



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna University of Technology



Diplomarbeit

Simulation der Benetzung laserstrukturierter Oberflächen mittels OpenFOAM

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines Diplom-
Ingenieurs (Dipl.-Ing oder DI),

eingereicht an der TU Wien, Fakultät für Maschinenwesen und Betriebs-
wissenschaften, von

Sebastian SKRNA

unter der Leitung von

Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Gerhard Liedl

Projektass. Dipl.-Ing. Roland Fürbacher BSc

Institut für Fertigungstechnik und Photonische Technologien (E311)

Getreidemarkt 9, 1060 Wien, Austria

Wien, 22.05.2023

Unterschrift Verfasser

Danksagung

Zunächst möchte ich mich bei den Mitgliedern der Forschungsgruppen Prozesssimulation und Prozesstechnik des Instituts für Fertigungstechnik und Photonische Technologien der TU Wien herzlich bedanken, die mich während der Anfertigung der Diplomarbeit unterstützt und motiviert haben. Mein besonderer Dank gebührt Prof. Gerhard Liedl und Dipl.-Ing. Roland Fürbacher, die meine Diplomarbeit betreut und begutachtet haben. Für die hilfreichen Anregungen und die großartige Zusammenarbeit möchte ich mich herzlichst bedanken. Ferner möchte ich mich beim gesamten Simulationsteam der Forschungsgruppe Prozesssimulation dafür bedanken, dass sich alle Kollegen für auftretende Fragen zum Simulationsprogramm OpenFOAM immer Zeit für mich genommen haben. Besonderer Dank gilt Prof. Andreas Otto, Dipl.-Ing. Michele Buttazoni und Dipl.-Ing. Constantin Zenz für deren konstruktiven Anregungen und Expertise.

Ebenfalls möchte ich mich ganz besonders bei meinen Eltern bedanken, die mir mein Studium durch ihre großartige Unterstützung ermöglicht haben und stets ein offenes Ohr für mich hatten. Außerdem gebührt mein aufrichtiger Dank meiner Großmutter, die durch ihre begeisterten Schilderungen aus ihrer Zeit als Flugbegleiterin der ersten Stunde bei der Austrian Airlines, mein Interesse an der Luftfahrt geweckt hat.

Des Weiteren danke ich meinem Kommilitonen Florian Wadl, der mir seit dem ersten Semester mit viel Geduld, Interesse und Hilfsbereitschaft zur Seite stand.

Abschließend möchte ich mich bei meinen Brüdern und meiner Freundin Karoline für den emotionalen Rückhalt während meines Studiums herzlich bedanken.

Diese Arbeit wurde von der österreichischen Forschungsförderungsgesellschaft (FFG) im Rahmen des Projekts NICE (871733) unterstützt.

Ich nehme zur Kenntnis, dass ich zur Drucklegung dieser Arbeit nur mit Bewilligung der Prüfungskommission berechtigt bin.

Eidesstattliche Erklärung

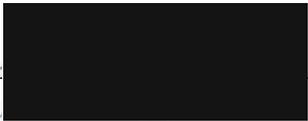
Ich erkläre an Eides statt, dass die vorliegende Arbeit nach den anerkannten Grundsätzen für wissenschaftliche Abhandlungen von mir selbstständig erstellt wurde. Alle verwendeten Hilfsmittel, insbesondere die zugrunde gelegte Literatur, sind in dieser Arbeit genannt und aufgelistet. Die aus den Quellen wörtlich entnommenen Stellen, sind als solche kenntlich gemacht.

Das Thema dieser Arbeit wurde von mir bisher weder im In- noch Ausland einer Beurteilerin/einem Beurteiler zur Begutachtung in irgendeiner Form als Prüfungsarbeit vorgelegt. Diese Arbeit stimmt mit der von den Begutachterinnen/Begutachtern beurteilten Arbeit überein.

Ich nehme zur Kenntnis, dass die vorgelegte Arbeit mit geeigneten und dem derzeitigen Stand der Technik entsprechenden Mitteln (Plagiat-Erkennungssoftware) elektronisch-technisch überprüft wird. Dies stellt einerseits sicher, dass bei der Erstellung der vorgelegten Arbeit die hohen Qualitätsvorgaben im Rahmen der geltenden Regeln zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis „Code of Conduct“ an der TU Wien eingehalten wurden. Zum anderen werden durch einen Abgleich mit anderen studentischen Abschlussarbeiten Verletzungen meines persönlichen Urheberrechts vermieden.

Wien, 22.05.2023

Stadt und Datum


Unterschrift

Kurzfassung

Die Benetzungseigenschaften einer Oberfläche hängen unter anderem von deren Mikrostruktur und Oberflächenenergie ab. Um das Benetzungsverhalten eines Wassertropfens auf unterschiedlichen Oberflächen beurteilen zu können, wurden im Rahmen der vorliegenden Diplomarbeit analytische, numerische sowie experimentelle Untersuchungen durchgeführt. Dabei wurden ebene, regelmäßig strukturierte und komplexe laserstrukturierte Oberflächen untersucht.

In einem ersten Schritt wurden die anfangs unbekanntes Festkörperoberflächenenergien durch optische Kontaktwinkelmessungen nach der Methode des liegenden Tropfens (Sessile-Drop-Methode) experimentell ermittelt. Die Berechnungen der Oberflächenenergien zwischen zwei Phasen erfolgte danach mit Hilfe der OWRK-Methode (Owens, Wendt, Rabel und Kaelble), die einen polaren und dispersiven Oberflächenenergieanteil berücksichtigt. Bei den nachfolgenden Simulationen mit der CFD-Software OpenFOAM kam ein modifizierter „multiphaseInterFoam“-Solver zur Anwendung, der es ermöglicht mehrere Phasen (Materialien) zu implementieren. Für die Simulation von ausgewählten laserstrukturierten Oberflächen wurden deren reale 3D-Geometriedaten gescannt, digitalisiert und in OpenFOAM mithilfe des Vernetzungswerkzeuges „snappyHexMesh“ vernetzt. Ein Vergleich der numerischen mit den experimentellen bzw. analytischen Ergebnissen zeigt, dass die Kontaktwinkel bei ebenen, polierten metallischen Oberflächen mit einer Abweichung von ca. zwei Prozent gut übereinstimmen. Hingegen gab es bei den laserstrukturierten Oberflächen Abweichungen von bis zu 40 Prozent. Dies ist einerseits auf die begrenzte Auflösung der digitalisierten Oberfläche sowie die Annäherung der Oberflächenstruktur durch die Vernetzung zurückzuführen. Andererseits ist diese Abweichung durch die sich zum Experiment stark unterscheidenden Größenverhältnisse zwischen der Oberflächenstruktur im Nanometerbereich und dem Durchmesser des Flüssigkeitstropfens im Millimeterbereich erklärbar, die aufgrund der verfügbaren Rechenressourcen nicht realgetreu simuliert werden konnten. Um das im Rahmen der Diplomarbeit erstellte Simulations-Setup an hierarchisch laserstrukturierten Oberflächen dennoch testen zu können, wurden Simulationen mit stark reduzierten Tropfenvolumina durchgeführt.

Mit den in Zukunft zu erwartenden steigenden Rechenkapazitäten wird ein detailliert vernetztes Modell der strukturierten Oberfläche und des experimentellen Wassertropfens simulierbar sein. Das im Rahmen der vorliegenden Diplomarbeit generierte Simulations-Setup kann damit als effiziente Methode eingesetzt werden, um das Benetzungsverhalten von laserstrukturierten Oberflächen beurteilen zu können.

Abstract

The wetting properties of a surface depend, among other things, on its microstructure and surface energy. In order to assess the wetting behavior of a water droplet on different surfaces, analytical, numerical and experimental investigations were carried out as part of this diploma thesis. Flat, regularly structured and complex laser-structured surfaces were examined.

In a first step, the initially unknown solid surface energies were experimentally determined by optical contact angle measurements using the sessile drop method. The surface energies between two phases were then calculated using the OWRK method (Owens, Wendt, Rabel and Kaelble), which considers a polar and a disperse surface energy component. For the subsequent simulations with the CFD software OpenFOAM, a modified "multiphaseInterFoam" solver was used, which allows several phases (materials) to be implemented simultaneously. In order to execute simulations of selected laser-structured surfaces, their real 3D geometry data were scanned, digitized and meshed in OpenFOAM using the meshing tool "snappyHexMesh". A comparison of the numerical with the experimental and analytical results shows that the contact angle measurements for flat, polished metallic surfaces agree well with a deviation of about two percent. In contrast, there were deviations of up to 40 percent for the laser-structured surfaces. On the one hand, this is due to the limited resolution of the digitized surface and the approximation of the surface structure through the meshing. On the other hand, this deviation can be explained by the fact that in the experiments the size ratios between the surface structure in the nanometer range and the diameter of the liquid droplet in the millimeter range differed greatly, which could not be realistically simulated due to the available computing resources. In order to test the simulation setup created as part of the diploma thesis on hierarchically laser-structured surfaces, simulations with greatly reduced droplet volumes were carried out.

With the increasing computing capacities expected in the future, a detailed meshed model of the surface structure and the experimental water droplet will be able to be simulated. The simulation setup generated within the scope of this diploma thesis can thus be used as an efficient method to assess the wetting behavior of laser-structured surfaces.

Nomenklatur

α	Volumenanteil einer Phase
δ	Sehr kleine Konstante, um Division durch den Wert Null zu vermeiden
θ	Allgemeiner Kontaktwinkel zwischen zwei Phasen
θ_{crit}	Kritischer Kontaktwinkel
θ_m	Gemessener makroskopischer Kontaktwinkel
θ_{CB}	Kontaktwinkel im Cassie-Baxter-Zustand
$\theta_{CH_2I_2}$	Kontaktwinkel zwischen Festkörper und Diiodmethantropfen
θ_{H_2O}	Kontaktwinkel zwischen Festkörper und Wassertropfen
θ_W	Kontaktwinkel im Wenzel-Zustand
θ_Y	Young'scher Kontaktwinkel
μ	Viskosität
ρ	Dichte
σ	Oberflächenenergie (allgemein)
$\sigma_{i,j}$	Grenzflächenenergie zwischen zwei beliebigen Phasen
σ_{LG}	Oberflächenspannung einer Flüssigkeit zur umgebenden Gasphase
σ_{SG}	Oberflächenenergie eines Festkörpers zur umgebenden Gasphase
σ_{SL}	Grenzflächenenergie zwischen Festkörper und Flüssigkeitsphase
σ^{AB}	Wechselwirkung zufolge Lewis-Säure/Base-Interaktion
σ^D	London'sche Dispersionswechselwirkung
σ^H	Wechselwirkung hervorgerufen durch Wasserstoffbrückenbindungen
σ^I	Wechselwirkungen nach Keesom und Debye
σ^O	Sonstige Wechselwirkungen
σ^P	Polare Wechselwirkung
σ^+	Lewis-Säureanteil der Oberflächenenergie einer Phase
σ^-	Lewis-Baseanteil der Oberflächenenergie einer Phase
Δ	Relative Differenz
∇	Nabla Operator
$A_{geometrisch}$	Geometrische Festkörperoberfläche
$A_{projiziert}$	Projizierte Festkörperoberfläche
A_{perm}	Durchlässigkeitsfläche eines porösen Mediums
S_{dr}	Verhältnis des Überschusses der wahren Fläche zur projizierten Fläche
S_a	Parameter der Oberflächenrauheit: mittlere arithmetische Höhe

S_z	Parameter der Oberflächenrauheit: maximale Höhe
S_{dq}	Parameter der Oberflächenrauheit: quadratischer Neigungsmittelwert
W_{SL}	Adhäsionsarbeit zwischen einer festen und flüssigen Phase
a	Abstand zwischen zwei benachbarten Säulen
$d_{\bar{x}}$	mittlere absolute Abweichung vom arithmetischen Mittelwert
f	Anteil der von der Flüssigkeit benetzten Festkörperoberfläche
h	Relative Höhe
h_s	Säulenhöhe
p	Druck
r	Rauheitsfaktor
t	Zeit
w	Säulenbreite
\bar{x}	Arithmetischer Mittelwert
τ	Viskoser Spannungstensor
\mathbf{g}	Vektor der Schwerkraft
\mathbf{u}	Geschwindigkeitsvektor
\mathbf{F}_B	Volumenkräfte zufolge der Schwerkraft
\mathbf{F}_D	Term für die Bewegungseinschränkung von Festkörpern
\mathbf{F}_S	Oberflächenkräfte zufolge der Oberflächenspannung

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung und Motivation	1
2.	Stand der Technik	3
3.	Theoretische Grundlagen	5
3.1.	Oberflächenenergie allgemein.....	5
3.2.	Benetzung und Kontaktwinkel	6
3.3.	Ermittlung der Festkörperoberflächenenergie und Grenzflächenenergie	8
3.3.1.	Modell nach Fowkes / OWRK.....	9
3.3.2.	Weitere Modelle	14
3.4.	Benetzungsmodelle nach Wenzel & Cassie-Baxter	16
4.	Beschreibung der verwendeten Software	19
4.1.	OpenFOAM Simulationssoftware	19
4.1.1.	Vor- und Nachteile von OpenFOAM	20
4.1.2.	Verzeichnisstruktur & Programmaufbau	20
4.2.	Autodesk Meshmixer.....	22
4.3.	Paraview 5.4.0	24
5.	Pre-Processing & Case-Aufbau	26
5.1.	Erstellung einer Vernetzung	27
5.1.1.	Vernetzungswerkzeug – blockMesh	27
5.1.2.	Vernetzungswerkzeug – snappyHexMesh.....	29
5.1.3.	Stationäre und dynamische Netzverfeinerung	33
5.2.	Definition der Anfangs- und Randbedingungen	34
5.3.	Festlegung der Materialeigenschaften.....	34
5.4.	Input & Output Steuerung.....	35
5.5.	Auswahl der Diskretisierungsmodelle	36
5.6.	Lösungs- und Algorithmussteuerung	36
5.7.	Feldzuweisung	37
5.8.	Weitere Einstellungen	37
5.9.	Starten und Stoppen einer Simulation	38
5.10.	Erstellung einer Animation	39
6.	Solver-Beschreibung	40
7.	Benetzung von ebenen Oberflächen	42
7.1.	Experimentelle Versuche.....	42
7.1.1.	Aufbau und Durchführung	42
7.1.2.	Experimentelle Ergebnisse.....	45
7.2.	Simulationen	51
7.2.1.	Case-Setup	51
7.2.2.	Simulationsergebnisse	53
7.3.	Vergleich der Versuchs- und Simulationsergebnisse.....	54
8.	Simulation von Wenzel- und Cassie-Baxter-Zuständen	57

8.1.	Definition der Oberflächengeometrie	57
8.2.	Analytische Berechnungen	58
8.3.	Case-Setup	60
8.4.	Simulationsergebnisse & Interpretation	61
9.	Benetzung von laserstrukturierten Oberflächen	67
9.1.	Strukturierung der Oberflächen	67
9.2.	Experimentelle Versuche.....	70
9.2.1.	Messungen unmittelbar nach der Herstellung.....	70
9.2.2.	Messungen nach Lagerung in einer Vakuumkammer.....	73
9.2.1.	Messungen nach der Beschichtung mit Platin	76
9.2.2.	Interpretation der experimentellen Messergebnisse	79
9.3.	Simulationen	85
9.3.1.	Skalierung der Oberflächengeometrie	85
9.3.2.	Case-Setup	86
9.3.3.	Simulationsergebnisse	93
9.4.	Vergleich der Versuchs- und Simulationsergebnisse	99
10.	Zusammenfassung, Fazit und Ausblick.....	101
11.	Literaturverzeichnis	105
12.	Abbildungsverzeichnis	110
13.	Tabellenverzeichnis	117
14.	Anhang.....	118
14.1.	Dateiauszüge: Benetzung ebener Oberflächen.....	118
14.1.1.	blockMeshDict.block3D	118
14.1.2.	dynamicMeshDict.orig	120
14.1.3.	AISI304.inp	121
14.1.4.	transportProperties	122
14.1.5.	setFieldsDict.orig	123
14.1.6.	controlDict.orig.....	124
14.2.	Dateiauszug: Wenzel- & Cassie-Baxter-Zustände	125

1. Einleitung und Motivation

Durch das Bearbeiten von Werkstoffoberflächen mittels Ultrakurzpuls-Laser ist es möglich, diese im Mikrobereich bzw. im Submikrobereich zu strukturieren. Die Ausprägung einer derartigen Oberflächenmodifikation hängt dabei maßgeblich von der eingesetzten Laserquelle, den Bearbeitungsparametern, der Bearbeitungsstrategie sowie den Materialeigenschaften des Substrates ab. Als Folge der Laserbehandlung, können die physikalischen und chemischen Oberflächeneigenschaften maßgeblich verändert werden. Beispielsweise lässt sich durch die Laserstrukturierung das Benetzungsverhalten einer Oberfläche entscheidend verändern, sodass hydrophile oder hydrophobe Oberflächen entstehen, die sich hinsichtlich des Anhaftens bzw. der Ausbreitung von Flüssigkeiten unterscheiden. Ausschlaggebend dafür welcher Fall eintritt, ist einerseits die Oberflächenenergie des Werkstoffes und andererseits die Strukturierung der Oberfläche. Feststellbar ist die Benetzungseigenschaft einer Materialoberfläche unter anderem mittels Tropfenkonturanalyse, bei der der Kontaktwinkel θ zwischen einem Flüssigkeitstropfen und der Oberfläche gemessen wird. Je nach Größe des Kontaktwinkels spricht man von hydrophilen ($\theta < 90^\circ$), hydrophoben ($\theta > 90^\circ$) oder superhydrophoben ($\theta > 150^\circ$) Oberflächen. In der vorliegenden Arbeit stehen laserstrukturierte Oberflächen mit hydrophoben und superhydrophoben Benetzungseigenschaften im Fokus.

Superhydrophobe Oberflächen haben in den letzten Jahrzehnten zunehmend an Bedeutung gewonnen und ihre Anwendungsmöglichkeiten sind sehr vielfältig. Beispielsweise ist es durch spezielle Beschichtungen möglich, Glasoberflächen mit wasserabweisenden und beschlagresistenten Eigenschaften herzustellen [1]. Die Beschichtung modifiziert die Oberflächenstruktur, da sie sehr kleine kegelförmige Nanostrukturen aufweist. Sie bewirkt, dass Wassertropfen auf den Kegelspitzen abprallen und die Oberfläche von Staub- und Schmutzpartikeln befreit wird. Neben diesem Selbstreinigungseffekt (auch Lotus-Effekt) können einfallende Lichtstrahlen in der Nanostruktur „eingefangen“ und somit die Reflexion reduziert werden. Zu den Anwendungsgebieten zählen unter anderem Brillen, Solarzellen und Smartphone-Displays.

Weiters kommen superhydrophobe Beschichtungen bei Textilien zur Anwendung [2]. Dadurch ist es möglich zum Beispiel Polyesterstoffe und Baumwolle mit wasserabweisenden Eigenschaften auszustatten. Somit sind unter anderem ein Nässeschutz, eine Schmutzabweisung und eine leichtere Reinigung gegeben.

Die individuelle Gestaltung der Oberflächenstruktur kommt in der Praxis aber auch bei Oberflächen, die möglichst eisfrei zu halten sind, zur Anwendung. Am Institut für Fertigungstechnik und photonische Technologien der TU Wien wird an der Erzeugung von derartigen Oberflächen, die im Bereich der Windenergie und Luftfahrt zur Anwendung kommen

sollen, geforscht. Als Beispiel sind hier Rotorblätter von Windkraftanlagen zu nennen, an denen sich bei entsprechenden Wetterverhältnissen, Schnee und Eis ansammeln können. Eine derartige Eisakkumulation führt zu einer ungleichförmigen Massenverteilung an den Rotorblättern und einer verstärkten Unwucht. Die dadurch entstehenden Vibrationen und Schwingungen können die Lebensdauer einer Windkraftanlage merklich verringern. Ferner besteht für den umgebenden Bereich einer Windkraftanlage eine große Gefahr durch sich ablösende und weggeschleuderte Eisansammlungen. Gesetzliche Bestimmungen schreiben in diesem Fall die Abschaltung einer Windkraftanlage vor, wodurch der mögliche Energieertrag deutlich verringert wird.

Im Bereich der Luftfahrt ist unter anderem das Eisfreihalten der Tragflächen von Passagierflugzeugen wichtig, um die Sicherheit der Passagiere gewährleisten zu können [3, 4]. Derzeit sind für das Abtauen von Eisansammlungen thermische Systeme im Einsatz, die jedoch viel Energie bzw. Kraftstoff verbrauchen und daher nur kurzzeitig und zyklisch eingesetzt werden können. Weiters besteht durch die erhöhten Temperaturen beim Abtauvorgang die Gefahr, dass Alterungsprozesse der Faserverbundwerkstoffe beschleunigt werden könnten, da deren Temperaturbeständigkeit, durch die der Matrix begrenzt wird. Um die bestehenden Systeme zu ersetzen, wird an passiven hydrophoben Oberflächen geforscht, die die Bildung von Eisakkumulationen verhindern sollen.

Aufgabe dieser Arbeit ist es, das Benetzungsverhalten von verschiedenen laserstrukturierten Oberflächen näher zu untersuchen. Es werden sowohl experimentelle Kontaktwinkelanalysen an ebenen und laserstrukturierten Oberflächen als auch entsprechende numerische Simulationen mit der Simulationssoftware OpenFOAM durchgeführt. Für die Simulation werden unter anderem reale 3D-Geometriedaten von laserstrukturierten Oberflächen eingesetzt.

Mit den gemessenen Kontaktwinkeln der realen Oberflächen kann auf die anfangs unbekanntes Oberflächenenergieanteile des Festkörpers geschlossen werden. Diese Festkörperoberflächenenergiewerte werden in das Simulations-Setup implementiert. Ziel ist es, die empirisch ermittelten Ergebnisse bei der Kontaktwinkelmessung in der Simulation anzunähern.

Mit derartigen Simulationen sollen die Benetzungszustände von Kombinationen beliebig strukturierter Festkörperoberflächen und verschiedenartiger Flüssigkeiten ermittelt werden. Dies führt zu einem besseren Verständnis des chemischen und topologischen Einflusses einer Festkörperoberfläche auf deren Benetzungseigenschaften. Dadurch können in weiterer Folge Oberflächengeometrien ermittelt werden, die für die oben beschriebenen hydrophoben Anforderungen und Anwendungen überaus erfolgsversprechend sind.

2. Stand der Technik

In den letzten Jahrzehnten wurden eine Reihe von Untersuchungen in Form von numerischen Simulationen, Laborexperimenten sowie rein theoretische Studien durchgeführt, um die Wechselwirkungen und Phänomene beim Kontakt eines Flüssigkeitstropfens auf einer Festkörperoberfläche sowohl in der Natur als auch bei technischen Anwendungen näher zu erklären.

Da eine exakte Bestimmung der Oberflächenenergie eines Festkörpers und der Grenzflächenenergie nicht möglich ist, bestehen zahlreiche analytische Methoden mit unterschiedlichen Ansätzen für eine Annäherung. In den meisten Modellen wird die zu bestimmende Oberflächenenergie in mehrere Anteile zerlegt, da die Annahme besteht, dass die Grenzflächenspannung durch verschiedene Wechselwirkungen an der Grenzfläche bestimmt werden kann. Bei den gängigsten Methoden ist das Messen des Kontaktwinkels mehrerer Flüssigkeiten und der Festkörperoberfläche erforderlich.

Während F. M. Fowkes [5, 6] davon ausging, dass sich die Oberflächenenergie eines Festkörpers und die Oberflächenspannung einer Flüssigkeit aus einer Summe von vielen unabhängigen Komponenten, die durch spezifischen Wechselwirkungen in Verbindung stehen, zusammensetzt, entwickelten Owens, Wendt, Rabel und Kaelble (OWRK) [7, 8, 9] einen Ansatz, der nur einen dispersiven und polaren Anteil enthält. Letztere ist die Methode nach Wu [10], die jener von OWRK sehr ähnlich ist, wobei bei der Bestimmung der Grenzflächenenergie, anstatt eines geometrischen Ansatzes, ein harmonischer verwendet wird. Das Modell nach Van Oss, Chaudhury und Good [11, 12] lässt bei der Berechnung neben einem dispersiven Anteil, einen Lewis-Säureanteil und Lewis-Basenanteil miteinfließen. Eine Methode für sehr hohe Oberflächenenergien stellt jene von Schultz [13] dar. Der Ansatz von Zisman [14] vernachlässigt wiederum die polaren Wechselwirkungen. Basis der hier beschriebenen Berechnungsmodelle ist die Young'sche Gleichung, deren Anwendung jedoch auf idealisierte, ebene Oberflächen beschränkt ist. Die OWRK-Methode ist die am meisten verwendete Methode, um die Oberflächenenergie von Festkörpern zu ermitteln, weshalb diese auch in der vorliegenden Arbeit verwendet wird.

Der topografische Einfluss von regelmäßig strukturierten Oberflächen auf deren Benetzungsverhalten, wurde schon in den 1930er und 1940er Jahren von Wenzel [15], Cassie [16] und Baxter [17] untersucht. Dabei wurden mathematische Zusammenhänge zwischen den Kontaktwinkeln einer Flüssigkeit auf einer ideal ebenen Oberfläche und einer regelmäßig strukturierten aufgestellt. Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, unter anderem diese analytischen Zusammenhänge in numerischen Simulationen zu überprüfen.

K. Vontas [18] und F. Gao [19] führten mithilfe der Simulationssoftware OpenFOAM verschiedene Simulationen von einem „Aufprall“ eines Flüssigkeitstropfens auf ideal ebenen „Oberflächen“ durch und verglichen die numerischen mit den experimentellen Ergebnissen. Dabei wurde vor allem die Dynamik des Flüssigkeitstropfens untersucht. Hierbei kam ein modifizierter „InterFoam“-Standardsolver von OpenFOAM zum Einsatz, der nur die Definition von zwei nicht mischbaren Phasen (hier Flüssigkeitstropfen und umgebende Luft) zulässt. Daher wurde der Festkörper als Randbedingung anstatt einer eigenen Phase definiert und diesem konnten daher keine physikalischen Eigenschaften, wie zum Beispiel die Oberflächenenergie, zugeordnet werden. Außerdem mussten die sich einstellenden Kontaktwinkel für die einzelnen Phasenpaare und Randbedingungen vorgegeben werden.

Y. Wu [20] führte ähnliche numerische Studien mit OpenFOAM durch, um den Aufprall und Abprall von Wassertropfen auf einer ebenen Oberfläche zu untersuchen. Weiters wurden Simulationen bezüglich der Koaleszenz zweier gleichzeitig aufprallender Tropfen durchgeführt und mit experimentellen Ergebnissen verglichen.

N. Boufous [21] beschäftigte sich bei ihren OpenFOAM-Simulationen mit sehr schnell auftretenden Wassertropfen auf ebenen und mikrostrukturierten superhydrophoben Oberflächen, um das Vereisen einer Flugzeugtragfläche zu simulieren. Es konnte gezeigt werden, dass die mikrostrukturierte superhydrophobe Oberfläche, im Vergleich zu der ebenen superhydrophoben Oberfläche in der Simulation ein schwächeres wasserabweisendes Verhalten aufweist. Allerdings wurden auch in dieser Arbeit die Kontaktwinkel vorgegeben und nicht näher untersucht.

Unter Berücksichtigung des derzeitigen Forschungsstandes, kommt im Zuge der vorliegenden Arbeit ein modifizierter „multiphaseInterFoam“-Solver zum Einsatz, der n verschiedene Phasen zulässt und es somit ermöglicht eine Festkörperoberfläche mit eigenen physikalischen Eigenschaften zu generieren. Ferner sind die sich einstellenden Kontaktwinkel in den Simulationen das Ergebnis von Berechnungen und können daher auch mit analytischen Werten verglichen werden.

3. Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel sollen die physikalischen Grundlagen des Einflusses der Oberflächenenergie auf das Benetzungsverhalten erläutert werden. Weiters werden Methoden zur Feststellung der Festkörperoberflächenenergie, sowie der Grenzflächenenergie beschrieben. Der letzte Teil setzt sich mit der Problemstellung der Benetzung von nicht ebenen Festkörperoberflächen auseinander.

3.1. Oberflächenenergie allgemein

Als Oberflächenenergie σ wird jene Energie bezeichnet, die bei der Erzeugung einer neuen Oberfläche eines Festkörpers oder einer Flüssigkeit benötigt wird, um chemische Bindungen aufzubrechen. Sie ist daher immer positiv und kann auch als jene Energie definiert werden, die pro Flächeneinheit erforderlich ist, um die Oberfläche zu vergrößern. Bei Flüssigkeiten ist die Oberflächenenergie der Oberflächenspannung gleichzusetzen, welche leicht bestimmbar ist. Die Oberflächenenergie von Festkörpern ist hingegen kaum direkt messbar, da bei der Schaffung einer neuen Oberfläche auch Energie für andere Prozesse, wie zum Beispiel die Verformung des Körpers aufgewendet werden muss [22].

Im Inneren eines Festkörpers bzw. einer Flüssigkeit sind die Moleküle im Allgemeinen stabil und haben eine ausgewogene Menge an Bindungen bzw. Wechselwirkungen, die in alle Richtungen gleich wirken. Im Gegensatz dazu haben Moleküle an der freien Stoffoberfläche einen unvollständigen und unausgeglichenen Satz von Wechselwirkungen, da sie nur mehr seitlich und innerhalb gleichartige Molekülbindungen eingehen (siehe Abbildung 1). Durch die geringe Wechselwirkung mit den Molekülen der Gasphase, bleibt überschüssige Energie an der Grenzfläche des Festkörpers bestehen. Die Oberflächenenergie kann daher auch als ein relatives Maß für die Energie an der Oberfläche eines Stoffes, welche aus den unvollständigen Bindungen hervorgeht, definiert werden [23, 24].

Jedes System hat das Bestreben, Oberflächen mit hoher Oberflächenenergie zu vermeiden oder zu minimieren, da der thermodynamisch stabile Zustand eines Systems derjenige mit der geringsten freien Energie ist [22]. Dies kann zum Beispiel durch das Adsorbieren eines Stoffes mit niedrigerer Oberflächenenergie erfolgen. Durch den Adsorptionsprozess wird die Zahl der freiliegenden Oberflächenatome mit hoher Oberflächenenergie minimiert und durch Atome oder Moleküle mit geringerer Energie ersetzt (siehe Abbildung 1) [23]. Zunächst soll der Zusammenhang zwischen der Oberflächenenergie und dem Benetzungsverhalten erläutert werden.

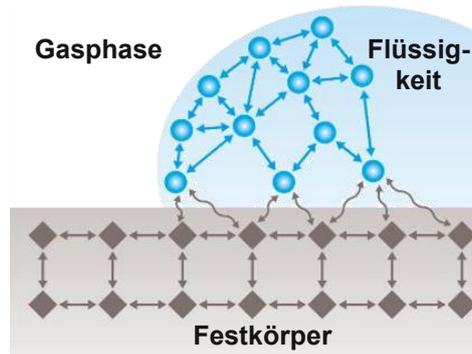


Abbildung 1: Ausgeglichene Wechselwirkungen im Inneren eines Stoffes und unausgeglichene Wechselwirkungen an der Oberfläche [24]

3.2. Benetzung und Kontaktwinkel

Die Oberflächenenergie von Festkörpern wird üblicherweise indirekt über Kontaktwinkelmessungen festgestellt. Der theoretische Kontaktwinkel θ eines Flüssigkeitstropfens auf einer Festkörperoberfläche in gasförmiger Umgebung wird an den Dreiphasenpunkten (Festkörper, Flüssigkeit und Gasphase) bestimmt (siehe Abbildung 2) und kann durch die Young'sche Gleichung ausgedrückt werden:

$$\cos(\theta) = \frac{\sigma_{SG} - \sigma_{SL}}{\sigma_{LG}} \quad (\text{Gl. 1})$$

Hierbei ist σ_{SG} die freie Oberflächenenergie (Wechselwirkung) des Festkörpers zur umgebenden Gasphase und σ_{LG} die Oberflächenspannung (Wechselwirkung) der Flüssigkeit zur umgebenden Gasphase, welche experimentell bestimmbar ist. σ_{SL} beschreibt die Grenzflächenenergie (Wechselwirkung) zwischen dem Festkörper und einem sich darauf befindlichen Flüssigkeitstropfen. Die Grenzflächenenergie ist nicht direkt messbar und systemabhängig. [25]

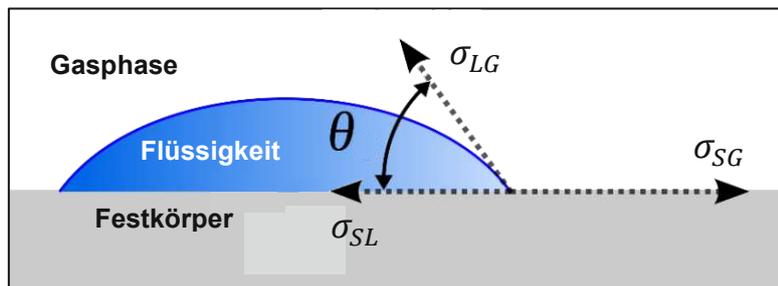


Abbildung 2: Darstellung des Kontaktwinkels θ eines Flüssigkeitstropfens auf einer festen Oberfläche in gasförmiger Umgebung [26]

Die Young'sche Gleichung ist für Dreiphasensysteme im thermodynamischen Gleichgewicht gültig, wenn die Festkörperoberfläche ideal eben (ohne Rauheit), nicht geneigt, homogen, nicht reaktiv und nicht deformierbar ist. Sie bildet die Grundlage für weitere Modelle zur Bestimmung der Oberflächenenergien von Festkörpern mit Hilfe von Kontaktwinkelmessungen [25, 27].

Die Größe des Kontaktwinkels hängt von der Höhe der Oberflächenenergie des Festkörpers σ_{SG} sowie der Oberflächenspannung der Flüssigkeit σ_{LG} ab. Dieser ist umso kleiner, je größer das Bestreben der in Kontakt tretenden Stoffe ist, sich chemisch zu binden. Unter der Annahme, dass die Flüssigkeit und der Festkörper, zu ähnlichen Polaritätswechselwirkungen fähig sind, kann allgemein gesagt werden, dass eine Festkörperoberfläche mit einer geringen Oberflächenenergie σ_{SG} schlecht benetzbar ist und der Kontaktwinkel θ mit einer Flüssigkeit einen hohen Wert annehmen wird (siehe Abbildung 3a). Der Grund hierfür ist, dass die Festkörperoberfläche nicht in der Lage ist, starke Bindungen mit der Flüssigkeit zu bilden. Für die Flüssigkeit besteht daher wenig energetische Motivation, die eigenen stärkeren „Massenbindungen“ zugunsten einer schwächeren Wechselwirkung mit der Festkörperoberfläche zu ersetzen. Eine Flüssigkeit mit einer hohen Oberflächenspannung σ_{LG} zeigt ein ähnliches Verhalten, da es für die Flüssigkeit günstiger ist, die Bindungen mit sich selbst aufrechtzuerhalten. Das Gegenteil bewirken Festkörper mit hohen Oberflächenenergien σ_{SG} bzw. Flüssigkeiten mit niedrigen Oberflächenspannungen σ_{LG} . In diesen Fällen kommt es zu einer sehr guten Benetzung und daher zu niedrigen Kontaktwinkeln (siehe Abbildung 3b-d) [23].

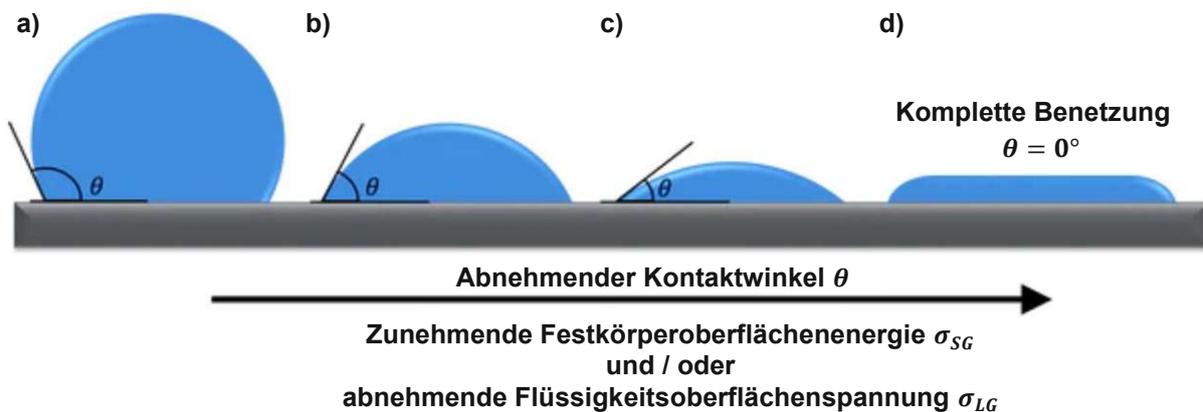


Abbildung 3: Grundlegendes Verhalten des Kontaktwinkels abhängig von der Oberflächenenergie von Festkörper und Flüssigkeit [23]

Ein Kontaktwinkel von $\theta = 0^\circ$ entspricht einer vollständigen Benetzung der Oberfläche. Liegt der Kontaktwinkel zwischen 0° und 90° , so wird die Festkörpermaterialoberfläche als partiell benetzbar bezeichnet. Bei der Verwendung von Wasser als Flüssigkeit, wird die Oberfläche als wasseranziehend (hydrophil) charakterisiert. Ist der Kontaktwinkel größer als 90° , so spricht man von einer hydrophoben (wasserabweisenden) Oberfläche, die eine sehr geringe Benetzbarkeit aufweist. Je größer der Kontaktwinkel wird, desto geringer wird die Benetzbarkeit der Oberfläche und ab einem Kontaktwinkel von ca. 150° wird eine Oberfläche als superhydrophob bezeichnet. Abbildung 4 zeigt einen Überblick über die aufgezählten Benetzungsgrade am Beispiel eines Wassertropfens.

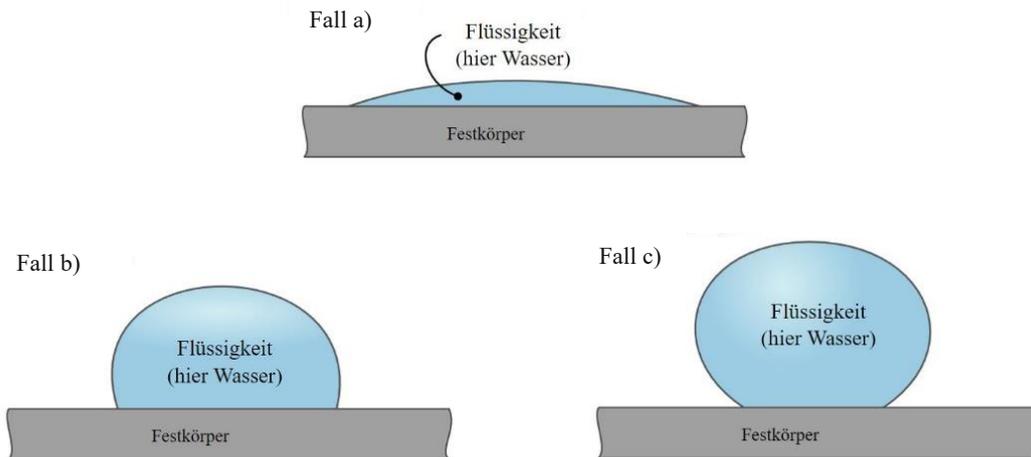


Abbildung 4: Benetzungseigenschaften von unterschiedlichen Wasser-Festkörper-Kombinationen [27]

Fall a) Kontaktwinkel zwischen 0° und 90° (hydrophil)

Fall b) Kontaktwinkel zwischen 90° und ca. 150° (hydrophob)

Fall c) Kontaktwinkel ab ca. 150° (superhydrophob)

Tabelle 1 zeigt den Zusammenhang zwischen den energetischen Verhältnissen zwischen den Phasen, den sich einstellenden Kontaktwinkeln und der daraus folgenden Benetzbarkeit.

Tabelle 1: Übersicht und Zusammenhang zwischen energetischen Verhältnissen und Benetzbarkeit [28]

Energetischer Zusammenhang	Kontaktwinkel θ	Benetzbarkeit
$\sigma_{SG} - \sigma_{SL} > \sigma_{LG}$	$\theta = 0^\circ$	komplett
$\sigma_{SG} - \sigma_{SL} > 0$	$0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$	partiell
$\sigma_{SG} - \sigma_{SL} < 0$	$90^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$	niedrig
$\sigma_{SL} - \sigma_{SG} > \sigma_{LG}$	$\theta = 180^\circ$	nicht vorhanden

3.3. Ermittlung der Festkörperoberflächenenergie und Grenzflächenenergie

Für die Ermittlung der Oberflächenenergie von Festkörpern σ_{SG} wurden im Laufe der Zeit mehrere Methoden mit unterschiedlichen Ansätzen entwickelt. In den meisten Modellen wird die zu bestimmende Oberflächenenergie in mehrere Anteile zerlegt, da die Annahme besteht, dass die Grenzflächenspannung σ_{SL} durch verschiedene Wechselwirkungen an der Grenzfläche bestimmt werden kann. Diese Wechselwirkungen sind sowohl von dem beteiligten Festkörper als auch von der Flüssigkeit abhängig. Basis vieler Berechnungsmodelle ist die Young'sche Gleichung (Gleichung 1), deren Anwendung jedoch auf idealisierte Oberflächen beschränkt ist. Für reale, raue Oberflächen sind die folgenden Modelle für die Ermittlung der Oberflächenenergie und Grenzflächenenergie nicht anzuwenden.

3.3.1. Modell nach Fowkes / OWRK

Frederick M. Fowkes ging in seinem Modell davon aus, dass sich die freie Oberflächenenergie eines Festkörpers und die Oberflächenspannung einer Flüssigkeit aus einer Summe unabhängiger Komponenten, die durch spezifischen Wechselwirkungen in Verbindung stehen, zusammensetzen, siehe Gleichungen 2 und 3 [29, 30].

$$\sigma_{SG} = \sigma_{SG}^D + \sigma_{SG}^P + \sigma_{SG}^H + \sigma_{SG}^I + \sigma_{SG}^{AB} + \sigma_{SG}^O \quad (\text{Gl. 2})$$

$$\sigma_{LG} = \sigma_{LG}^D + \sigma_{LG}^P + \sigma_{LG}^H + \sigma_{LG}^I + \sigma_{LG}^{AB} + \sigma_{LG}^O \quad (\text{Gl. 3})$$

Hierbei steht σ_{SG}^D bzw. σ_{LG}^D für die London'schen Dispersionswechselwirkungen, die als schwache Anziehungskräfte zwischen ungeladenen, unpolarisierten Atomen und Molekülen definiert sind [31]. Sie resultieren aus einer temporären ungleichmäßigen Ladungsverteilung in Bezug auf den Atomkern oder dem Gravitationszentrum eines Moleküls [32]. Polare Wechselwirkungen (σ_{SG}^P bzw. σ_{LG}^P) treten auf, wenn Moleküle ein permanentes elektrisches Dipolmoment aufweisen. Das bedeutet, dass sie eine konstante Ladungsverschiebung besitzen und die dadurch hervorgerufene hohe Elektronegativitätsdifferenz zu einer Anziehung führt [33]. σ_{SG}^H bzw. σ_{LG}^H repräsentiert den Anteil der Wechselwirkungen, die durch Wasserstoffbrückenbindungen hervorgerufen werden. Bei dieser Art der Wechselwirkung ist ein Wasserstoffatom an ein Atom mit höherer Elektronegativität gebunden und bildet daher eine positive Teilladung aus. Da dem Wasserstoffatom dadurch Elektronen fehlen, können sich Wechselwirkungen mit freien Elektronenpaaren anderer elektronegativer Atome ausbilden [34]. Die Wechselwirkungen nach Keesom und Debye werden mit σ_{SG}^I bzw. σ_{LG}^I angegeben und werden, neben den London'schen Dispersionswechselwirkungen, den Van-der-Waals-Kräften zugeordnet. Eine ständig wechselnde Ladungsverteilung führt dazu, dass ein Molekül nur einen temporären Dipol-Zustand einnehmen kann. Ein Dipol-Zustand entsteht, wenn der größte Abstand zwischen den verschiedenen Ladungen eines Moleküls erreicht ist. Temporäre Dipole treten nur bei sehr ähnlichen Elektronegativitäten in den Molekülen selbst auf. Weiters ist es möglich, dass bei unpolaren Molekülen ein Dipol-Zustand durch ein Molekül im Dipol-Zustand induziert wird. Die Keesom-Wechselwirkung beschreibt die Anziehung zwischen zwei Molekülen im temporären Dipol-Zustand. Eine Anziehung zufolge der Debye-Wechselwirkung tritt auf, wenn ein Molekül im temporären Dipolzustand auf ein unpolares Molekül trifft und dort eine temporäre Ladungsverschiebung (Dipolmoment) induziert [31]. Die Wechselwirkung zufolge der Lewis-Säure/Base-Interaktionen fließt mit dem Term σ_{SG}^{AB} bzw. σ_{LG}^{AB} ein. Diese Art der Wechselwirkung beruht auf der Bindung zwischen einer Lewis-Base, die ein freies Elektronenpaar aufweist (Elektronendonator) und einer Lewis-Säure, die durch ihre positive Ladung das Bestreben hat, Elektronen anzuziehen (Elektronenakzeptor) [35]. σ_{SG}^O bzw. σ_{LG}^O repräsentieren sonstige Wechselwirkungen.

Owens, Wendt, Rabel und Kaelble (OWRK) entwickelten den Ansatz von Fowkes weiter und betrachteten alle Anteile, außer den Anteil für die Dispersionswechselwirkung σ_{SG}^D bzw. σ_{LG}^D , als den polaren Anteil σ_{SG}^P bzw. σ_{LG}^P . Dies wurde damit begründet, dass die Anzahl der Dispersionswechselwirkungen dominierend ist und eine Aufteilung der mengenmäßig geringeren polaren Anteile vernachlässigbar ist. Somit beurteilt die OWRK-Methode die für die Oberflächenenergie ausschlaggebenden zwischenmolekulare, kohäsiven Wechselwirkungen zwischen einer Flüssigkeit und einem Festkörper hinsichtlich der London'schen Dispersionswechselwirkung und einem zusammengefassten polaren Anteil, siehe Gleichungen 4 und 5 [30, 36].

$$\sigma_{SG} = \sigma_{SG}^D + \sigma_{SG}^P \quad (\text{Gl. 4})$$

$$\sigma_{LG} = \sigma_{LG}^D + \sigma_{LG}^P \quad (\text{Gl. 5})$$

Im Vergleich zu den dispersiven, können polare Wechselwirkungen eine bis zu zehnfach höhere Bindungsenergie ausbilden. Daher besitzen diese einen größeren Einfluss auf die Adhäsion [32].

Um die Grenzflächenspannung und somit die Wechselwirkungen zwischen Festkörper und Flüssigkeit in Beziehung zu setzen, wird die Dupré-Gleichung herangezogen:

$$\sigma_{SL} = \sigma_{LG} + \sigma_{SG} - W_{SL} \quad (\text{Gl. 6})$$

Die Wechselwirkungen werden allgemein durch die Adhäsionsarbeit W_{SL} beschrieben. Die Adhäsionsarbeit stellt einerseits jene Arbeit dar, welche aufgewendet werden muss, um zwei Phasen zu trennen, andererseits ist sie auch jene Energie, die bei der Benetzung freigesetzt wird [23]. Setzt man nun die Dupré-Gleichung in die Young'sche Gleichung (Gleichung 1) ein, so erhält man die Young-Dupré-Gleichung (Gleichung 7), welche als Ausgangsform vieler Oberflächenenergiemodelle verwendet wird [23].

$$W_{SL} = \sigma_{LG} \cdot (1 + \cos(\theta)) \quad (\text{Gl. 7})$$

Der Ansatz nach OWRK in Bezug auf die Adhäsionsarbeit W_{SL} ist in Gleichung 8 abgebildet.

$$W_{SL} = 2 \cdot \left(\sqrt{\sigma_{LG}^D \cdot \sigma_{SG}^D} + \sqrt{\sigma_{LG}^P \cdot \sigma_{SG}^P} \right) \quad (\text{Gl. 8})$$

Es ist anzumerken, dass die OWRK-Theorie für jede Art der Wechselwirkung das geometrische Mittel verwendet [23]. Durch das Gleichsetzen des OWRK-Ansatzes für die Adhäsionsarbeit W_{SL} (Gleichung 8) und der Young-Dupré-Gleichung (Gleichung 7) erhält man den folgenden Zusammenhang:

$$\left(\sqrt{\sigma_{LG}^D \cdot \sigma_{SG}^D} + \sqrt{\sigma_{LG}^P \cdot \sigma_{SG}^P} \right) = \frac{\sigma_{LG} \cdot (1 + \cos(\theta))}{2} \quad (\text{Gl. 9})$$

Für die Berechnung der nicht bekannten Oberflächenenergie eines Festkörpers σ_{SG} muss zunächst der Kontaktwinkel zwischen der Festkörperoberfläche und einer rein dispersiven Flüssigkeit gemessen werden. Das bedeutet, dass der polare Anteil der Oberflächenspannung der Flüssigkeit nicht vorhanden ist ($\sigma_{LG}^P = 0 \frac{J}{m^2}$) und daher der dispersive Anteil der gesamten Oberflächenspannung entspricht ($\sigma_{LG} = \sigma_{LG}^D$) [23].

Als rein disperse Flüssigkeit kann zum Beispiel Diiodmethan (CH_2I_2) verwendet werden, welches aufgrund der molekularen Symmetrie (siehe Abbildung 5) keinen polaren Oberflächenspannungsanteil besitzt ($\sigma_{LG,CH_2I_2}^P = 0 \frac{J}{m^2}$). Die Oberflächenspannung von Diiodmethan wird als $\sigma_{LG,CH_2I_2} = \sigma_{LG,CH_2I_2}^D = 0,0508 \frac{J}{m^2}$ angegeben [23].

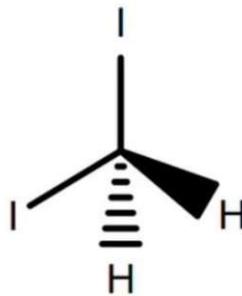


Abbildung 5: Strukturformel von Diiodmethan (CH_2I_2) [23]

Setzt man diese Bedingungen einer rein dispersiven Flüssigkeit in Gleichung 9 ein, kann der Oberflächenenergieanteil des Festkörpers zufolge der London'schen Dispersionswechselwirkung ermittelt werden:

$$\sigma_{SG}^D = \frac{\sigma_{LG,CH_2I_2} \cdot (1 + \cos(\theta_{CH_2I_2}))^2}{4} \quad (\text{Gl. 10})$$

Im nächsten Schritt werden Kontaktwinkelmessungen zwischen der Festkörperoberfläche und einer Flüssigkeit mit bekannten dispersiven und polaren Oberflächenspannungsanteilen durchgeführt [23]. Hierbei bietet sich reines Wasser (H_2O) an, welches folgende Oberflächenspannungsanteile bei einer Temperatur von 20°C besitzt:

$$\begin{aligned} \sigma_{LG,H_2O}^D &= 0,0218 \frac{J}{m^2} & \sigma_{LG,H_2O}^P &= 0,051 \frac{J}{m^2} \\ \sigma_{LG,H_2O} &= \sigma_{LG,H_2O}^D + \sigma_{LG,H_2O}^P & &= 0,0728 \frac{J}{m^2} \end{aligned}$$

Durch das Einsetzen der Oberflächenspannungsanteile von Wasser und dem zuvor berechneten dispersiven Oberflächenenergieanteil des Festkörpers σ_{SG}^D in Gleichung 9, erhält man den polaren Oberflächenenergieanteil des Festkörpers σ_{SG}^P .

$$\sigma_{SG}^P = \frac{1}{\sigma_{LG,H_2O}^P} \cdot \left(\frac{\sigma_{LG,H_2O} \cdot (1 + \cos(\theta_{H_2O}))}{2} - \sqrt{\sigma_{LG,H_2O}^D \cdot \sigma_{SG}^D} \right)^2 \quad (\text{Gl. 11})$$

Die gesamte Oberflächenenergie des Festkörpers ergibt sich aus der Summe des dispersiven und des polaren Anteils, wie in Gleichung 4 angegeben.

Weiters lässt sich Gleichung 9 in Gleichung 12 umformen und man erhält einen linearen Zusammenhang der Form $y = m \cdot x + c$, den man grafisch darstellen kann [23].

$$\frac{\sigma_{LG} \cdot (1 + \cos(\theta))}{2 \cdot \sqrt{\sigma_{LG}^D}} = \sqrt{\sigma_{SG}^P} \cdot \frac{\sqrt{\sigma_{LG}^P}}{\sqrt{\sigma_{LG}^D}} + \sqrt{\sigma_{SG}^D} \quad (\text{Gl. 12})$$

In Abbildung 6 ist der gemessene Kontaktwinkel über der Oberflächenspannung der Flüssigkeit dargestellt. Nach der Eintragung der Ergebnisse mehrerer Flüssigkeiten sollte eine lineare Trendlinie erkennbar sein. Der Schnittpunkt (c) dieser Trendlinie mit der Ordinate ergibt den dispersiven Anteil der Festkörperoberflächenenergie in der Form $\sqrt{\sigma_{SG}^D}$ und die Steigung (m) ist mit der Wurzel des polaren Anteils der Festkörperoberflächenenergie gleichzusetzen.

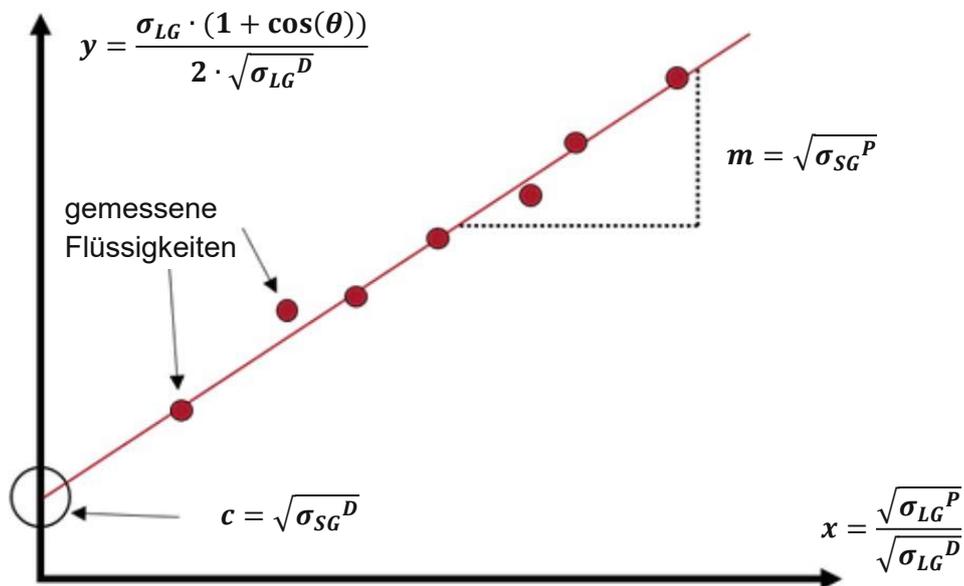


Abbildung 6: Grafische Darstellung der OWRK-Methode mit Hilfe von den Ergebnissen von mehreren Flüssigkeiten zur Bestimmung der dispersiven und polaren Oberflächenenergieanteile eines Festkörpers [23]

Unbekannt ist nun noch die Grenzflächenenergie σ_{SL} zwischen der Flüssigkeit und der Festkörperoberfläche. Ausgehend von dem hier beschriebenen Modell, hängt diese davon ab, wie stark sich die dispersiven und polaren Wechselwirkungen zwischen den beiden Phasen ausbilden können. Die folgende Gleichung 13 beschreibt die Grenzflächenenergie σ_{SL} zwischen einer beliebigen Flüssigkeit und einem beliebigen Festkörper nach OWRK [37].

$$\sigma_{SL} = \sigma_{SG} + \sigma_{LG} - 2 \cdot \left(\sqrt{\sigma_{LG}^D \cdot \sigma_{SG}^D} + \sqrt{\sigma_{LG}^P \cdot \sigma_{SG}^P} \right) \quad (\text{Gl. 13})$$

Die folgenden Abbildungen 7 und 8 zeigen die schematische Darstellung des Phasenkontaktes des beschriebenen Zweikomponenten-Modells [37]. In den Abbildungen sind die gesamten Oberflächenenergien der festen und flüssigen Phase gleich groß ($\sigma_{LG} = \sigma_{SG} = 0,05 \text{ J/m}^2$), wobei die polaren und dispersiven Oberflächenenergieanteile durch verschiedenfarbige Hände dargestellt sind. Beim Aufeinandertreffen der Phasen können nur die gleichartigen Hände eine Wechselwirkung bewirken. In Abbildung 7 ist zu sehen, dass die Flüssigkeit und der Festkörper unterschiedlich große polare und disperse Oberflächenenergieanteile aufweisen, wodurch nicht alle Hände ineinandergreifen bzw. nur eine eingeschränkte Wechselwirkung zustande kommt. Dadurch ergibt sich ein bestimmter Kontaktwinkel θ und eine bestimmte Grenzflächenenergie σ_{SL} .

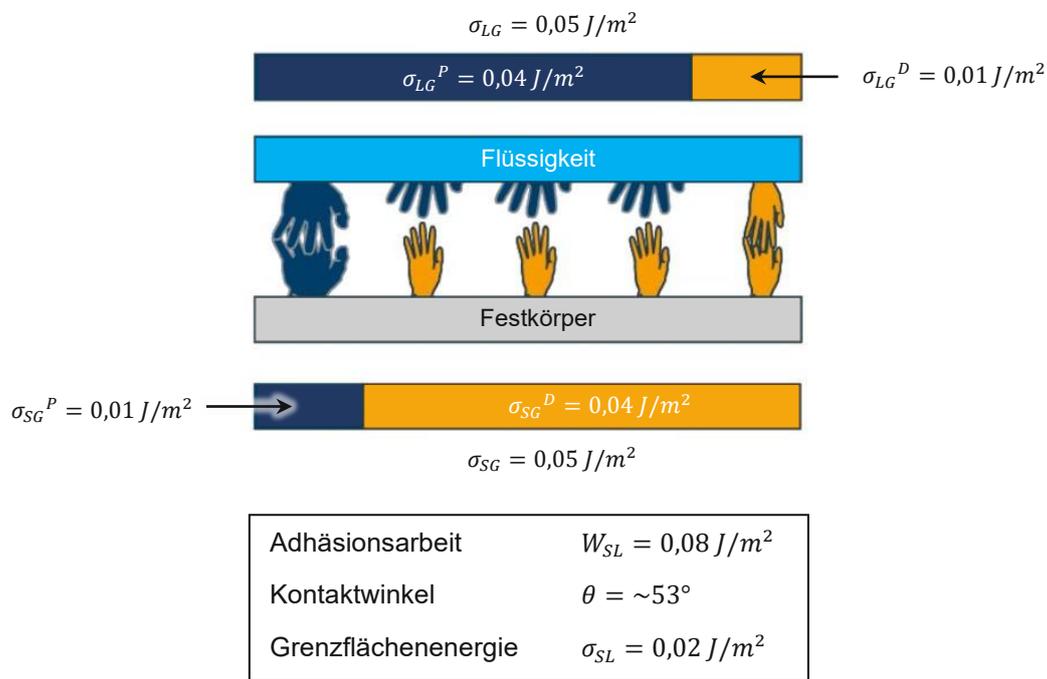


Abbildung 7: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen zwischen einer Flüssigkeit und einem Festkörper mit unterschiedlichen polaren und dispersiven Oberflächenenergieanteilen [37]

Haben jedoch beide Phasen gleich große polare und disperse Oberflächenenergieanteile (siehe Abbildung 8), so hat jede Hand einen passenden Partner und es können sich eine Vielzahl an Wechselwirkungen ausbilden. Dies hat eine komplette Benetzung ($\theta = 0^\circ$) zufolge und die Grenzflächenenergie σ_{SL} nimmt den Wert Null an.

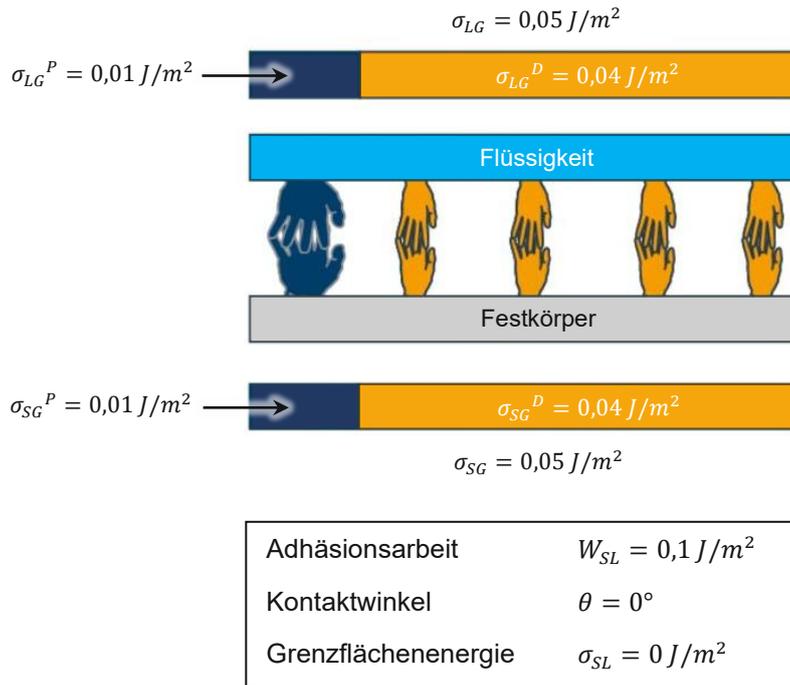


Abbildung 8: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen zwischen einer Flüssigkeit und einem Festkörper mit gleichen polaren und dispersiven Oberflächenenergieanteilen [37]

Die OWRK-Methode ist die am meisten verwendete Methode, um die Oberflächenenergie von Festkörpern zu ermitteln, weshalb sie auch in der vorliegenden Arbeit eingesetzt wird. Mit dieser Methode soll der chemische Einfluss einer Festkörperoberfläche in die späteren Simulationen einfließen.

3.3.2. Weitere Modelle

In diesem Kapitel sollen folgende weitere Modelle kurz erläutert werden:

- Modell nach Wu
- Säure-Basen-Modell nach Van Oss, Chaudhury und Good
- Modell nach Schultz
- Modell nach Zisman

Das Modell nach Wu verwendet die grundlegenden Überlegungen vom OWRK-Modell, jedoch wird anstatt eines geometrischen Mittels ein harmonisches Mittel beim Ansatz verwendet [30]. Auch diese Methode benötigt mindestens zwei verschiedene Flüssigkeiten, wobei eine davon rein dispersiv sein muss. Wu kritisiert die geometrische Mittelwertgleichung von OWRK, da diese seiner Ansicht nach die polaren Wechselwirkungen unterschätzt. Dieses Modell kommt bei Polymeren, sowie bei organischen Lösungen und Farbstoffen zur Anwendung. Die folgende Gleichung 14 definiert die Grenzflächenenergie σ_{SL} nach Wu und Gleichung 15 drückt den Zusammenhang des Wu-Ansatzes mit der Young-Dupré-Gleichung aus:

$$\sigma_{SL} = \sigma_{SG} + \sigma_{LG} - 4 \cdot \left(\frac{\sigma_{LG}^D \cdot \sigma_{SG}^D}{\sigma_{LG}^D + \sigma_{SG}^D} + \frac{\sigma_{LG}^P \cdot \sigma_{SG}^P}{\sigma_{LG}^P + \sigma_{SG}^P} \right) \quad (\text{Gl. 14})$$

$$\left(\frac{\sigma_{LG}^D \cdot \sigma_{SG}^D}{\sigma_{LG}^D + \sigma_{SG}^D} + \frac{\sigma_{LG}^P \cdot \sigma_{SG}^P}{\sigma_{LG}^P + \sigma_{SG}^P} \right) = \frac{\sigma_{LG} \cdot (1 + \cos(\theta))}{4} \quad (\text{Gl. 15})$$

Beim Säure-Basen-Modell nach Van Oss, Chaudhury und Good setzt sich die Grenzflächenenergie σ_{SL} aus einem dispersiven, einem Lewis-Säureanteil und einem Lewis-Basenanteil zusammen, siehe Gleichung 16 [30]. Gemäß der Säure-Base-Theorie nach Lewis wechselwirken Elektronendonatoren (–) mit Elektronenakzeptoren (+).

$$\sigma_{SL} = \sigma_{SG} + \sigma_{LG} - 2 \cdot \left(\sqrt{\sigma_{LG}^D \cdot \sigma_{SG}^D} + \sqrt{\sigma_{LG}^+ \cdot \sigma_{SG}^-} + \sqrt{\sigma_{LG}^- \cdot \sigma_{SG}^+} \right) \quad (\text{Gl. 16})$$

Für die Bestimmung der Grenzflächenenergie werden mindestens zwei verschiedene Flüssigkeiten mit bekannten sauren und basischen Anteilen, sowie eine rein disperse Flüssigkeit wie z.B. Diiodmethan benötigt. Da diese Methode vorrangig bei biologischen Systemen und Biopolymeren zum Einsatz kommt, wird dieses Modell in der vorliegenden Arbeit nicht weiterverfolgt.

Eine weitere Methode, die bei Festkörpern mit sehr hohen Oberflächenenergien angewendet wird, stellt jene von Schultz dar [30]. Obwohl auch die oben beschriebenen Methoden hierfür verwendet werden könnten, besteht bei diesen Festkörperoberflächen das Problem, dass die Kontaktwinkel sehr nahe bei Null liegen und somit ein geringfügiger Fehler in den Messungen zu erheblichen Abweichungen in den Berechnungen führen kann. Aus diesem Grund schlägt Schultz ein Verfahren vor, bei dem eine Flüssigkeit zur Messung des Kontaktwinkels verwendet wird, während der Festkörper in eine andere Flüssigkeit eingetaucht wird. Da zwei Flüssigkeiten mit dem Festkörper in Kontakt sind, müssen die Wechselwirkungen zwischen dem Festkörper und beiden Flüssigkeiten berücksichtigt werden. Da in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich hydrophobes und superhydrophobes Benetzungsverhalten untersucht wird, wird auch diese Methode nicht weiter ausgeführt.

Die letzte Methode, die in diesem Kapitel beschrieben wird, ist jene von Zisman [23]. Dieses Modell geht davon aus, dass die Oberflächenenergie eines Festkörpers mit der maximalen Oberflächenspannung derjenigen Flüssigkeit gleichzusetzen ist, die einen Kontaktwinkel von 0° auf dieser Festkörperoberfläche aufweist. Diese Oberflächenspannung der vollständigen Benetzung wird auch kritische Oberflächenspannung genannt. Für eine grafische Veranschaulichung werden die Kontaktwinkel (in der Form $\cos(\theta)$) für eine Reihe von Flüssigkeiten über die Oberflächenspannung der jeweiligen Flüssigkeiten σ_{LG} aufgetragen (siehe Abbildung 9). Es wird eine lineare Trendlinie erstellt und extrapoliert, um die Oberflächenspannung für $\cos(\theta) = 1$ zu finden. Der Wert der Oberflächenenergie beim Schnittpunkt der linearen Trendlinie mit dem konstanten Wert $\cos(\theta) = 1$ entspricht der Festkörperoberflächen-

energie σ_{SG} . Da die Zisman-Methode den Einfluss der polaren Wechselwirkungen nicht beachtet, ist dieses Modell nur für unpolare Oberflächen anzuwenden. Da bei den zu untersuchenden Oberflächen das Vorhandensein eines polaren Anteil zu erwarten ist, wird dieses Modell nicht weiter erläutert.

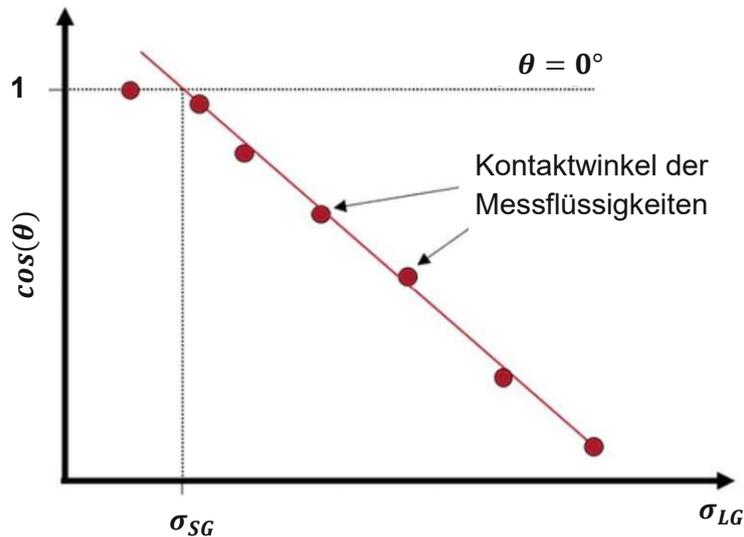


Abbildung 9: Zisman-Methode zur Bestimmung der Oberflächenenergie einer Festkörperoberfläche [23]

3.4. Benetzungsmodelle nach Wenzel & Cassie-Baxter

Es ist zu beachten, dass die in Kapitel 3.3 beschriebenen Modelle zur Ermittlung der Grenzflächenenergie nur für idealisierte (ebene) und chemisch homogene Oberflächen gelten. Die zu untersuchenden realen, laserstrukturierten Oberflächen zeichnen sich jedoch durch eine gewisse Oberflächenrauheit und lokal unterschiedliche chemische Zusammensetzungen aus. Außerdem reagieren laserstrukturierte Oberflächen in Abhängigkeit der Bearbeitungsparameter und der Zusammensetzung des Materials mit Molekülen der Atmosphäre, in der sie gelagert werden. Diese können von der Oberfläche adsorbiert werden und dadurch kann sich ihr Benetzungszustand signifikant ändern [38]. Die im folgenden erklärten Zustände beschreiben den Einfluss der Oberflächentopografie auf das Benetzungsverhalten.

Appliziert man einen Flüssigkeitstropfen auf eine strukturierte Oberfläche und benetzt dieser die Struktur ohne Lufteinschlüsse an der Grenzfläche, so liegt ein sogenannter Wenzel-Zustand vor (siehe Abbildung 10a). Liegt der Flüssigkeitstropfen jedoch nur auf den Spitzen der feinen Strukturen der Oberfläche auf und schließt Luft unter sich ein, so spricht man von einem Cassie-Baxter-Zustand (siehe Abbildung 10b) [39].

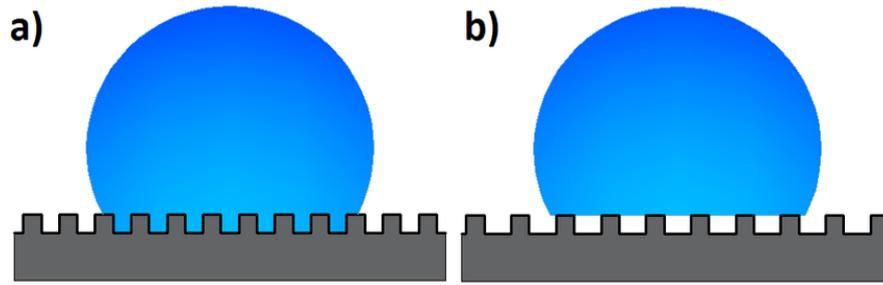


Abbildung 10: Schematische Darstellung des Wenzel- (a) und Cassie-Baxter-Zustandes (b) [40]

Die Größe und Form der Oberflächenstrukturen, die Oberflächenspannung des Flüssigkeitstropfens und die Oberflächenenergie des Festkörpers sind maßgebend dafür, welcher der beiden Zustände sich einstellen wird [39]. Unter der Voraussetzung, dass der Flüssigkeitstropfen vorsichtig und mit sehr niedriger Geschwindigkeit auf die Festkörperoberfläche aufgebracht wird, ist die Energie, mit der der Tropfen auf die Oberfläche trifft zu vernachlässigen.

Auf einer realen Oberfläche ist der tatsächliche Kontaktwinkel jener Winkel zwischen der Tangente an der Flüssigkeits-Gasphasen-Grenzfläche im Dreiphasenpunkt und der tatsächlichen lokalen Oberfläche des Festkörpers. Der gemessene makroskopische Kontaktwinkel θ_m entspricht jedoch dem Winkel zwischen der Tangente an der Flüssigkeits-Gasphasen-Grenzfläche und einer Linie, die die scheinbare Oberfläche des Festkörpers darstellt (siehe Abbildung 11). Der tatsächliche und der gemessene makroskopische Kontaktwinkel können erheblich voneinander abweichen [41].



Abbildung 11: Schematische Darstellung des gemessenen makroskopischen Kontaktwinkels θ_m auf einer strukturierten Oberfläche im Wenzel-Zustand [41]

Wenzel hat folgendes mathematisches Verhältnis („Wenzel-Gleichung“) zwischen dem Kontaktwinkel θ nach Young auf einer ideal ebenen, unstrukturierten Oberfläche und dem gemessenen Kontaktwinkel θ_m auf einer strukturierten Oberfläche desselben Materials aufgestellt [39]:

$$\cos(\theta_m) = r \cdot \cos(\theta) \quad (\text{Gl. 17})$$

Hierbei ist r der Rauheitsfaktor, welcher dem Verhältnis zwischen der geometrischen Festkörperoberfläche ($A_{\text{geometrisch}}$) und der projizierten ($A_{\text{projiziert}}$) entspricht:

$$r = \frac{A_{\text{geometrisch}}}{A_{\text{projiziert}}} \quad (\text{Gl. 18})$$

Für den Rauheitsfaktor gilt $r \geq 1$, da die projizierte Oberfläche nicht größer sein kann als die geometrische Oberfläche. Aus der Wenzel-Gleichung kann man schließen, dass der Kontaktwinkel θ_m aufgrund der Oberflächenstrukturierung unterhalb von 90° kleiner wird und oberhalb von 90° größer wird. Demnach werden dadurch rechnerisch hydrophile Festkörperoberflächen noch hydrophiler und hydrophobe Festkörperoberflächen noch hydrophober [39]. Die Wenzel-Gleichung ist eine Näherung, die umso genauer wird, je größer der Flüssigkeitstropfen im Vergleich zur Größenordnung der Oberflächenrauheit ist [42].

Bei ideal regelmäßig strukturierten Oberflächen ist der Rauheitsfaktor analytisch leicht zu ermitteln. Werden jedoch komplex strukturierte Festkörperoberflächen untersucht, benötigt man zum Beispiel ein optisches Messgerät, um den Rauheitsfaktor feststellen zu können. Gleichung 19 setzt den Rauheitsfaktor mit dem gemessenen Verhältnis des Überschusses der wahren Fläche zur projizierten Fläche (S_{dr}) in Verbindung [42]:

$$r = 1 + \frac{S_{dr}}{100} \quad (\text{Gl. 19})$$

In jenen Fällen, in denen die Flüssigkeit nicht in die „Täler“ der strukturierten Oberfläche eindringt und sich ein Luftporenschluss bildet, wird die Cassie-Baxter-Gleichung (Gl. 20) angewendet. Es findet nur an den „Strukturspitzen“ der Festkörperoberfläche eine Benetzung statt [40].

$$\cos(\theta_m) = f \cdot \cos(\theta) + f - 1 \quad (\text{Gl. 20})$$

Hierbei ist f der Anteil der vom Tropfen benetzten Festkörperoberfläche. Dieser Zustand soll den Einfluss einer heterogenen Oberfläche widerspiegeln.

4. Beschreibung der verwendeten Software

4.1. OpenFOAM Simulationssoftware

OpenFOAM steht für „Open-source Field Operation And Manipulation“ und ist ein freies, numerisches Simulationssoftwarepaket, welches zum Lösen von Problemen im Bereich der Kontinuumsmechanik und numerischen Strömungsmechanik angewendet wird. Diese Simulationssoftware ist in der Programmiersprache C++ geschrieben und hat eine große und weitreichende Anwenderbasis in den meisten Bereichen der Ingenieurwissenschaften, sowohl für den kommerziellen als auch den akademischen Gebrauch. Es sind unter anderem Werkzeuge für das „Vernetzen“ von komplexen Geometrien, Datenverarbeitung und Visualisierung enthalten. Nahezu alle Berechnungen können standardmäßig parallel durchgeführt werden, wodurch die Vorteile der Mehrkernprozessoren und Mehrprozessorkomputer vollständig genutzt werden können [43].

Für das Erlernen der grundlegenden Funktionsweise von OpenFOAM ist ein kostenloses Benutzerhandbuch (User Guide) online verfügbar. In diesem wird die Simulationsumgebung zunächst mittels Tutorial-Übungen nähergebracht und danach mit einer detaillierteren Beschreibung der einzelnen Komponenten fortgeführt. Die Gesamtstruktur von OpenFOAM ist in Abbildung 12 dargestellt.

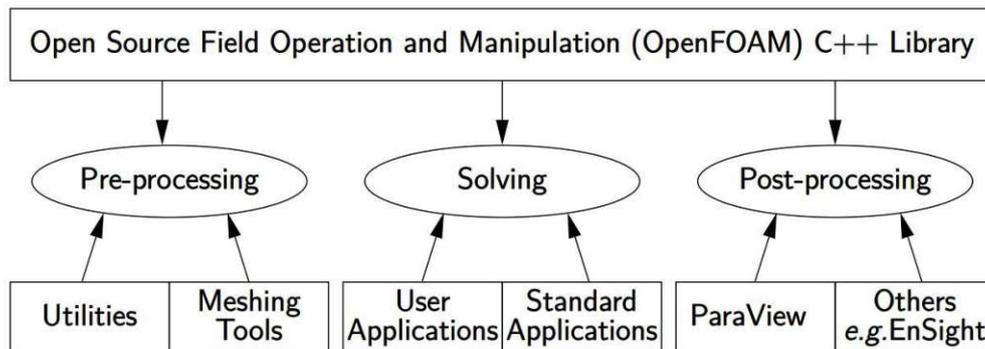


Abbildung 12: Gesamtstruktur von OpenFOAM [44]

Der Benutzer legt im Pre-Processing-Schritt alle Parameter und Einstellungen für die verwendeten Datenmanipulationsanwendungen (Utilities) in den zugehörigen Dateien fest und fertigt eine gewünschte Benetzung (Mesh) mit Benetzungswerkzeugen (Meshing Tools) an. Nachdem das Pre-Processing abgeschlossen ist, wird mit Hilfe eines existierenden Standard-Lösers (Standard-Application oder -Solver) oder eines durch den Benutzer erstellten Lösers (User-Application) die Simulation ausgeführt. Abschließend können die gerechneten Ergebnisse mittels Visualisierungsapplikation, zum Beispiel mit dem Programm ParaView, visualisiert und analysiert werden. Die erhaltenen Ergebnisse von OpenFOAM können auch in andere Dateiformate konvertiert werden, sodass diese mit anderen Post-Processor-Applikationen interpretiert werden können [44, 45].

4.1.1. Vor- und Nachteile von OpenFOAM

Mithilfe von CFD-Software (Computational Fluid Dynamics) wie OpenFOAM, werden allgemein sehr komplexe Probleme aus dem Gebiet der Strömungsmechanik untersucht. Je komplexer die Geometrie, ihre Bewegung oder eine Strömung sind, desto mehr Rechenleistung wird benötigt, um eine angemessene Simulation, in Bezug auf Genauigkeit und Simulationszeit, durchzuführen. Der Vorteil von OpenFOAM ist, dass die parallel ausgeführte Berechnungsmethode bereits implementiert ist und der Benutzer unbegrenzt viele Kerne (Cores) auf HPC-Maschinen (High Performance Computing) verwenden kann. Die zu berechnende Aufgabenstellung wird in „Anteile“ zerlegt, welche von separaten Prozessoren berechnet werden. Während der Berechnungen kommunizieren diese Prozessoren miteinander und nach Abschluss der Berechnungen werden die gelösten Anteile wieder zusammengesetzt. Weitere Vorteile von OpenFOAM sind, dass die Lizenz kostenlos ist und der Benutzer freien Zugang zum Quellcode (Source code) hat und diesen, bei Bedarf, bearbeiten und weiterentwickeln kann.

Den vielen Vorteilen von OpenFOAM stehen aber auch einige Nachteile gegenüber. Wie bei open-source Software oft üblich, fehlt eine vollständige Dokumentation und professionelle Unterstützung. Es ist zwar ein kostenloses Benutzerhandbuch vorhanden, jedoch werden in diesem nur die groben Grundlagen behandelt. Bei expliziten Problemstellungen können Foren nach ähnlichen Problemstellungen durchsucht werden und dessen Community um Rat befragt werden. Weiters ist zu erwähnen, dass bei dieser Simulationssoftware keine integrierte Benutzeroberfläche (GUI – Graphical User Interface) für das Pre-Processing, die Solver-Einstellungen und das Monitoring der Simulationen vorhanden ist. Für das Ändern einer bestimmten Einstellung, muss die entsprechende Datei, mit dem beinhaltenden Code, mit einem Texteditor geöffnet und nach der Änderung der Einstellung wieder gespeichert werden. OpenFOAM ist für Betriebssysteme, die auf Linux basieren erhältlich. Ein MS-Windows geführtes Betriebssystem benötigt zusätzlich ein Subsystem für Linux. Außerdem ist die Kenntnis von Unix-Befehlen und C++ Programmierung von großem Vorteil [45, 46].

4.1.2. Verzeichnisstruktur & Programmaufbau

Da sich ein paar Verzeichnis- und Parameterbezeichnungen in den einzelnen Versionen von OpenFOAM unterscheiden, ist anzumerken, dass für diese Arbeit mit Version 6 gearbeitet wurde. Abbildung 13 zeigt die grundlegende Verzeichnisstruktur, die die minimal erforderlichen Dateien für eine OpenFOAM-Simulation enthält.

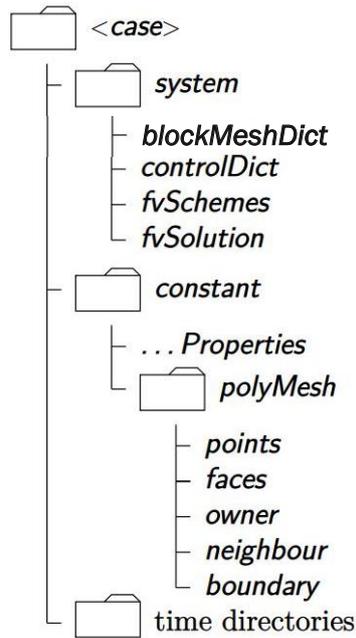


Abbildung 13: Grundlegende Verzeichnisstruktur einer OpenFOAM-Simulation [44]

Das Hauptverzeichnis (<case>), in dem die Unterverzeichnisse „system“, „constant“ und die „time directories“ (Zeit-Verzeichnisse) vorliegen, kann vom Benutzer frei benannt werden. Das Unterverzeichnis „constant“ enthält eine vollständige Beschreibung der Vernetzung (Mesh) in einem Ordner namens „polyMesh“ und weitere Dateien, in denen die physikalischen Eigenschaften für die Simulation spezifiziert werden [44, 45].

Im Unterverzeichnis „system“ werden Parameter in einzelnen Dateien definiert, die dem Lösungsverfahren zugeordnet sind. Die Dateien „controlDict“, „fvSchemes“ und „fvSolution“ müssen zumindest in diesem Verzeichnis enthalten sein. Falls die verwendete Geometrie nicht von einem externen Programm vernetzt wurde, finden sich die Grundeinstellungen hierfür in der Datei „blockMeshDict“. Die „controlDict“-Datei enthält Kontroll- und Steuerungsparameter mit denen unter anderem die Start- und Endzeit, die Zeitschrittgröße und die Ausgabeeinstellungen geregelt werden können. In der „fvSchemes“-Datei können die für die Lösung verwendeten Diskretisierungsschemata ausgewählt werden. Gleichungslöser, Toleranzen und weitere Algorithmenkontrollen werden in der „fvSolution“-Datei definiert.

Die Zeit-Verzeichnisse enthalten einzelne Dateien mit Daten für bestimmte Skalar- oder Vektorfelder zum Beispiel Geschwindigkeit, Druck und Temperatur. OpenFOAM verlangt, dass Felder immer initialisiert werden müssen, auch wenn die Lösung dies nicht unbedingt erfordert, wie zum Beispiel bei stationären Problemen. Da eine Simulation normalerweise zum Zeitpunkt $t = 0$ gestartet wird, werden die Anfangs- und Randbedingungen daher im Zeitverzeichnis 0 festgelegt. Dies ist dann das einzige Zeitverzeichnis vor dem Start einer Simulation. Während der Simulation werden automatisch Zeitverzeichnisse mit dem Namen der simulierten Zeitpunkte, erstellt [44, 45].

4.2. Autodesk Meshmixer

Das kostenlose Programm Meshmixer von Autodesk bietet die Möglichkeit, die mittels optischem 3D Oberflächenmessgerät gescannte Oberfläche (STL-File) zu bearbeiten. Einerseits dient diese Software bei der vorliegenden Arbeit dazu, Fehlstellen (Löcher) in den gescannten digitalen Oberflächendateien aufzuspüren und zu schließen, andererseits kann die Oberfläche damit zugeschnitten, vervielfacht und abschließend mit einem komplett neuen Dreiecksgitternetz versehen werden.

Die Vorgehensweise bei der Vorbereitung einer gescannten 3D-Oberfläche für die spätere Simulation beginnt mit dem Importieren der zu bearbeitenden STL-Datei. Im ersten Schritt werden die zu bearbeitenden Fehlstellen angezeigt. Hierzu wird in der linken Menüleiste die Funktion „Analysis“ ausgewählt und in der sich daraufhin öffnenden Menüleiste die „Inspector“-Funktion (Lupensymbol) angeklickt. Nun werden die einzelnen Defekte mit verschiedenfarbigen kugelförmigen Pins angezeigt (siehe Abbildung 14).

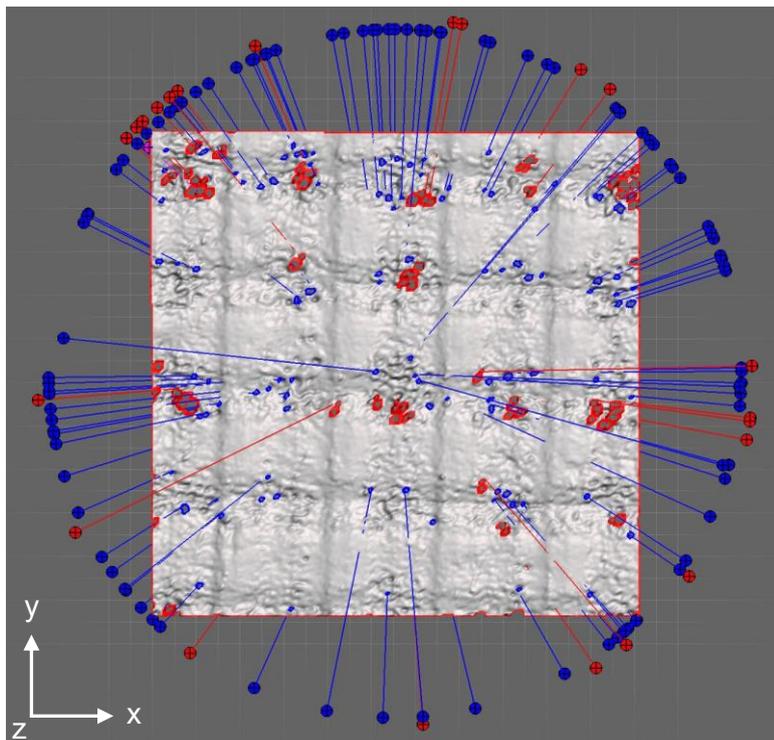


Abbildung 14: Angezeigte Fehlstellen im STL-File einer gescannten Oberfläche

Dabei zeigt ein blauer Pin ein Loch im Netz an, ein roter Pin macht darauf aufmerksam, dass in dem markierten Bereich ein Fehler (non-manifold area) im 3D-Modell vorhanden ist und ein pinker Pin weist auf sehr kleine, nicht verbundene Flächen im Netz hin. Durch das Klicken auf die einzelnen Pins werden die damit verbundenen Fehlstellen automatisch korrigiert. Fehlstellen, welche sich innerhalb der gescannten Oberfläche befinden, können ohne Probleme behoben werden. Befindet sich eine Fehlstelle jedoch am Rand der gescannten Oberfläche, können Probleme beim „Schließen“ auftreten (siehe Abbildung 15).

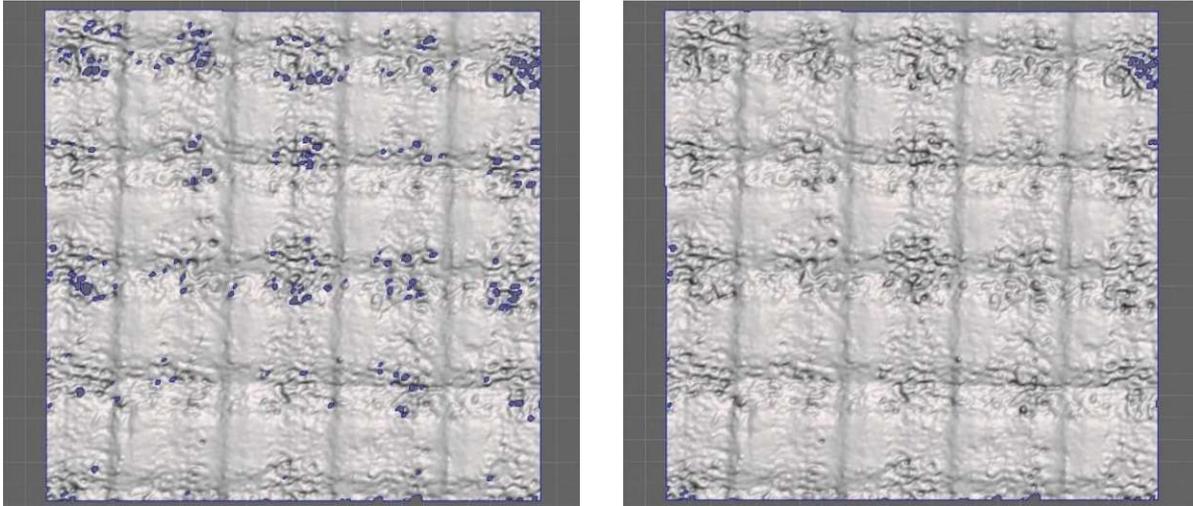


Abbildung 15: Oberfläche mit Fehlstellen (links); Oberfläche nach Bearbeitung (rechts)

Durch das „Abschneiden“ des äußeren Randes und des wiederholten Vernetzens mit dem Meshmixer-Programms können derartige Fehlstellen beseitigt werden. Das „Schneiden“ einer Oberfläche kann mit der „Plane Cut“-Funktion in der Kategorie „Edit“ in der linken Menüleiste bewerkstelligt werden. Bezüglich des neuerlichen Vernetzens muss in der linken Menüliste auf das „Select“-Feld geklickt und die gesamte reparierte Oberfläche mit der Tastenkombination „Strg+A“ ausgewählt werden. Der ausgewählte Bereich färbt sich orange und es öffnet sich eine neue Menüleiste, in der „Edit“ und dann „Remesh“ gewählt wird. In diesem Menü können einige Vernetzungsparameter eingestellt und die Vernetzungsmethode ausgewählt werden. Die einzelnen Zellen können in der oberen Menüleiste unter „View“ und „Show Wireframe“ sichtbar gemacht werden.

Wegen der einigermaßen periodischen Oberflächenstrukturierung können mit geringem Aufwand, durch das Kopieren und Zusammenfügen mehrerer kleiner Ausschnitte, größere Oberflächen erzeugt werden. Hierfür steht das Werkzeug der Spiegelung zur Verfügung, welches die gespiegelte Fläche um die x-z- oder y-z-Ebene automatisch mit der ursprünglichen Fläche verbindet und die „Inspector“-Funktion nur wenige Überdeckungsfehlstellen entdeckt. Nach der gewünschten Vervielfachung der Fläche, ist ein erneutes Vernetzen (Remeshen) durchzuführen. Abbildung 16 zeigt eine Vervielfachung jener Fläche aus Abbildung 15.

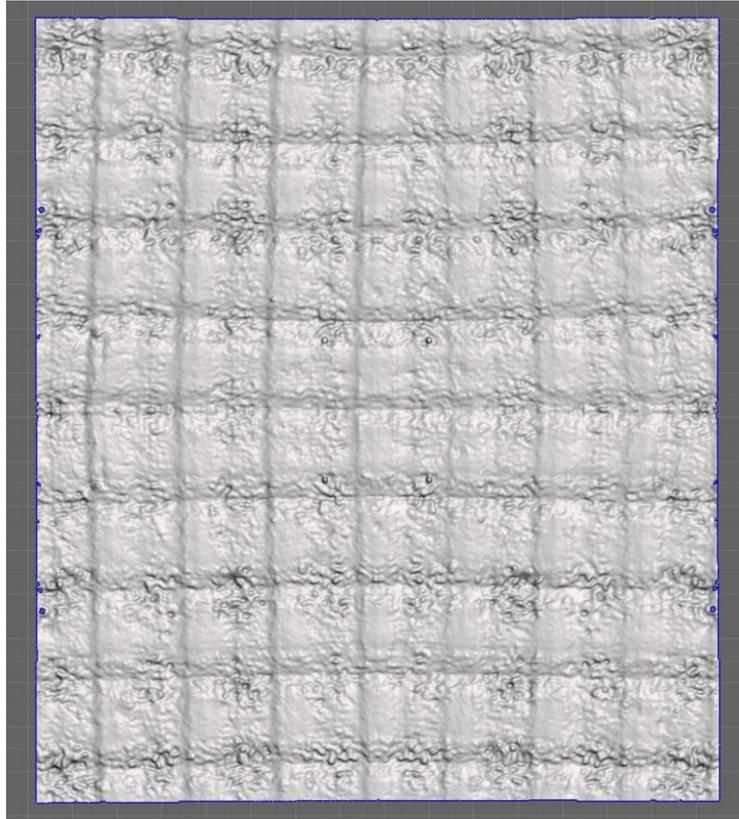


Abbildung 16: Vervielfachung jener Fläche aus Abbildung 15

4.3. Paraview 5.4.0

Um die Ergebnisse der OpenFOAM-Simulation zu visualisieren, kommt das open-source Post-Processing-Programm „ParaView“ zum Einsatz. Zum Öffnen von ParaView wird in der Konsole der Befehl „paraview &“ eingegeben und es öffnet sich ein Fenster, welches in Abbildung 17 zu sehen ist.

Der Pipeline Browser (Abbildung 17a) listet die in ParaView geöffneten Module auf, wobei die ausgewählten Module mit blauer Hintergrundfarbe hervorgehoben werden. Die grafische Ausgabe eines Modules kann durch das Anklicken des Augensymbols neben der Modulbezeichnung im Pipeline Browser aktiviert werden und wird im rechten Teil der ParaView-GUI angezeigt (Abbildung 17d). Das Bedienfeld „Properties“ (Abbildung 17b) beinhaltet eine Eingabeauswahl für das ausgewählte Modul. Hier kann zum Beispiel eingestellt werden, welche Felder und Regionen von der Vernetzung angezeigt werden sollen und globale Einstellungen vorgenommen werden. Weiters kann in diesem Bereich auch die visuelle Darstellung des ausgewählten Moduls geändert werden. Damit jede geänderte Einstellung im Properties-Bedienfeld berücksichtigt wird, muss anschließend der grüne „Apply“-Buttons im oberen Bereich geklickt werden.

Den obersten Teil der ParaView-GUI nehmen verschiedene Schaltflächenleisten ein (Abbildung 17c). Mit diesen kann zum Beispiel die Navigation der einzelnen Zeitschritte kontrolliert und die gewünschten Einstellungen bezüglich der Ansicht vorgenommen werden. Weiters ist es möglich die gewünschte Eigenschaft auszuwählen, welche grafisch angezeigt werden soll. Verschiedene Datenanalysefilter zur besseren Darstellung können ebenfalls angewendet werden. Abschließend ist noch zu erwähnen, dass mit dem Programm ParaView auch Animationen erstellt werden können.

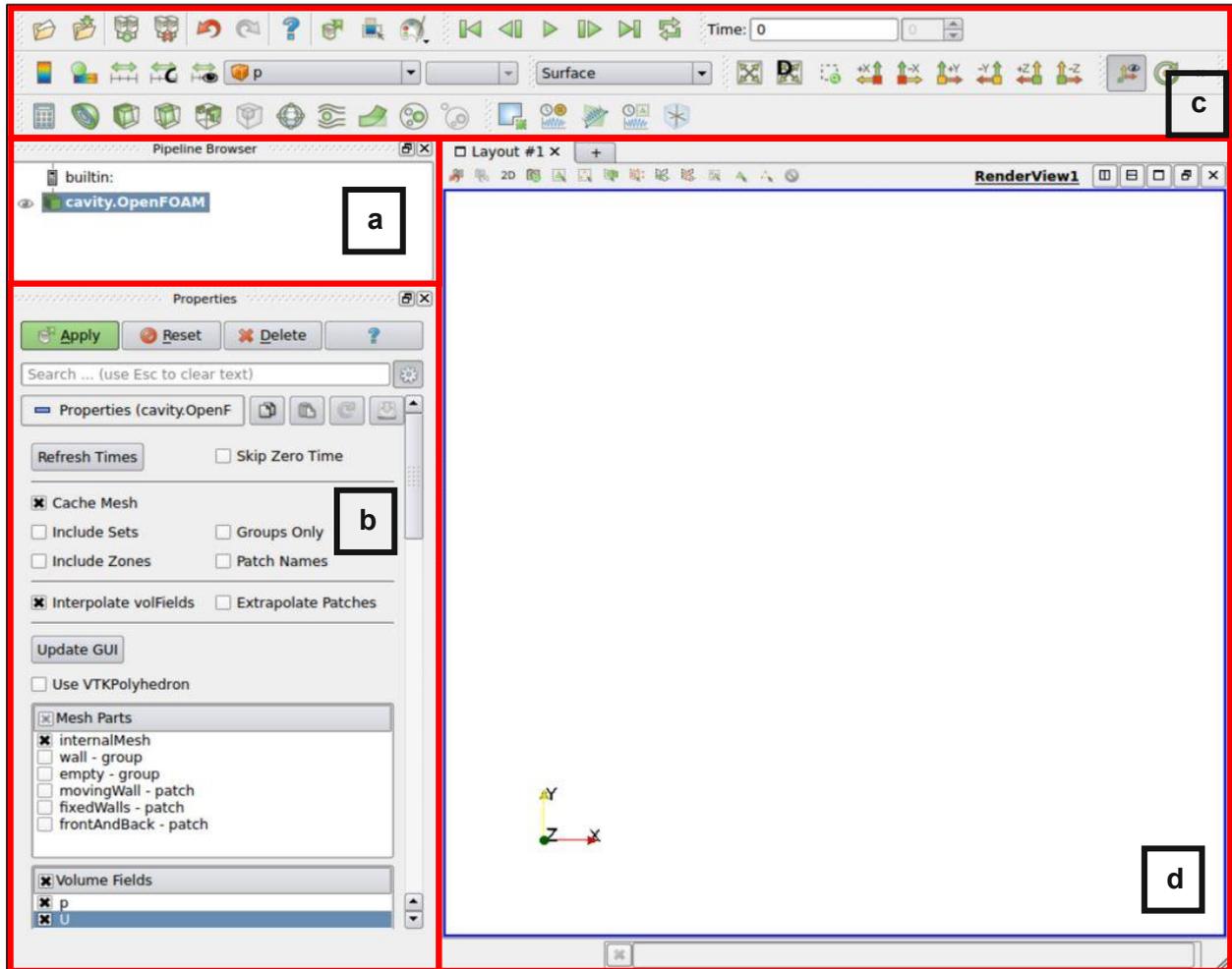


Abbildung 17: Grundlegender Aufbau der ParaView-Visualisierungssoftware: Pipeline Browser (a), Properties (b), Zeit- und Ansichtseinstellungen (c), grafische Ausgabe der Simulation (d)

5. Pre-Processing & Case-Aufbau

In diesem Kapitel soll der Aufbau der im Rahmen dieser Arbeit erstellten „Simulations-Cases“ näher erläutert und die Vorgangsweise beim Arbeiten mit OpenFOAM (Version 6) beschrieben werden. Die folgenden Auflistungen in den Abbildungen 18-21 zeigen die enthaltenen Verzeichnisse und Dateien eines Simulations-Cases vor dem Simulationsstart. Diese werden in den folgenden Unterkapiteln ausführlich beschrieben.

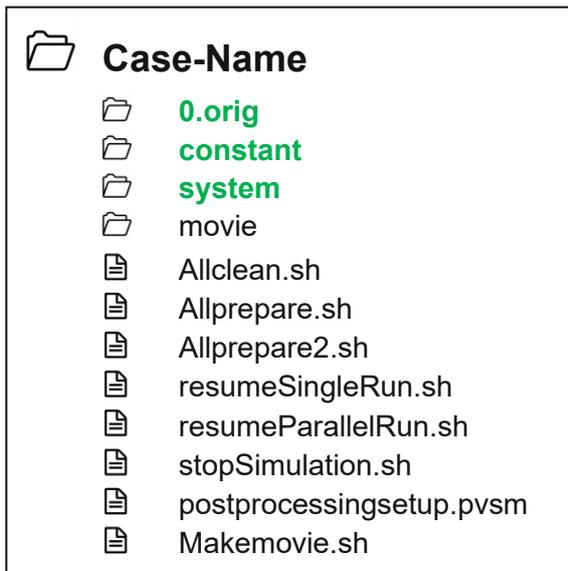


Abbildung 18: Übersicht Simulationscase-Verzeichnis

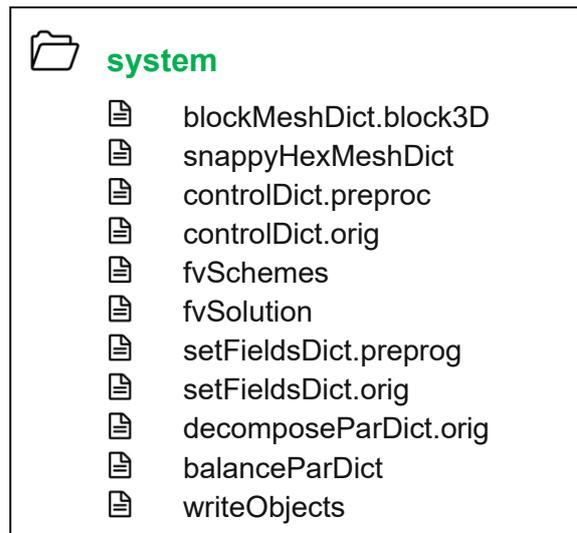


Abbildung 19: Übersicht system-Verzeichnis

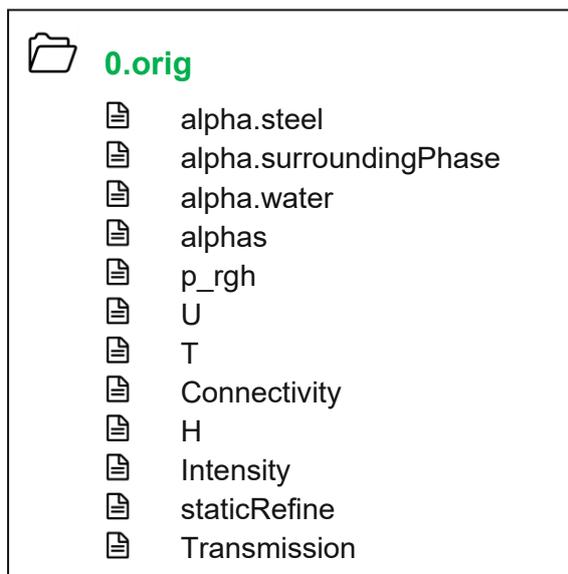


Abbildung 20: Übersicht Zeitverzeichnis

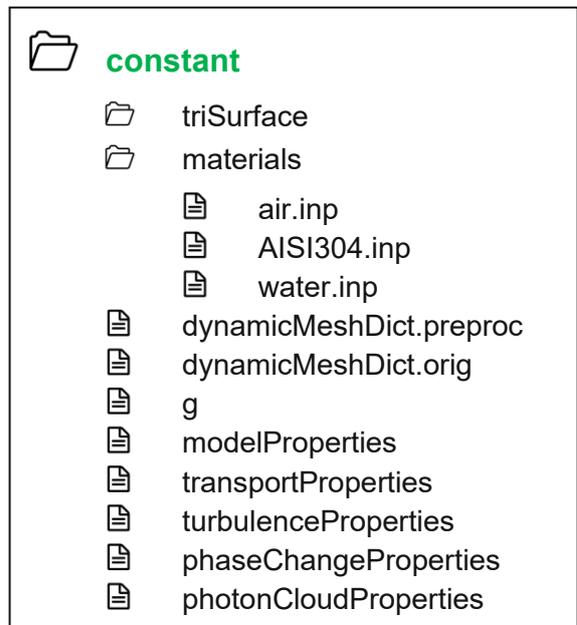


Abbildung 21: Übersicht constant-Verzeichnis

Die grundsätzliche Arbeitsweise gliedert sich anfangs in die Erstellung der gewünschten Geometrie und deren Vernetzung (Mesh-Generation). Anschließend werden die Einstellungen für die Simulation eines Cases vorgenommen. Abschließend wird die Simulation gestartet und die Ergebnisse im Post-Processing-Programm ParaView visualisiert und begutachtet.

Zunächst ist zu erwähnen, dass die ersten sieben Zeilen einer jeden Datei allgemeine Informationen über das Programm OpenFOAM enthalten. Danach folgt ein Sub-Dictionary namens „FoamFile“, das Informationen bezüglich der ausgewählten Datei enthält. Es wird beispielsweise die Input/Output Formatversion (version), das Zeichenkodierungsformat (format), die Kategorie (class), der Pfad zur Datei (location) und der Dateiname (object) angegeben (siehe Abbildung 22). Die Angabe der Formatversion und des Dateipfades ist optional.

```

1  /----- C++ -----/
2  |
3  | \   /   F i e l d       | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  |  \ /    O p e r a t i o n   | Version: dev
5  |   / \   A n d             | Web:      www.OpenFOAM.org
6  |  /   \   M a n i p u l a t i o n |
7  |-----/
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         volVectorField;
13     location      "0";
14     object        U;
15 }

```

Abbildung 22: Kopf eines Parameterfiles mit Informationen über OpenFOAM und die ausgewählte Datei

5.1. Erstellung einer Vernetzung

Für die Vernetzung, der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen, wurden die in OpenFOAM integrierten Vernetzungswerkzeuge angewendet. Es ist anzumerken, dass OpenFOAM stets in einem dreidimensionalen kartesischen Koordinatensystem arbeitet und auch alle Geometrien dreidimensional erzeugt werden.

5.1.1. Vernetzungswerkzeug – blockMesh

Das Prinzip der blockMesh-Vernetzung besteht darin, die Domain-Geometrie in einen Satz von einem oder mehreren dreidimensionalen, hexaederförmigen Blöcken zu zerlegen. Die Einstellungen hierfür werden in der Datei „blockMeshDict.block3D“ im Verzeichnis „system“ vorgenommen. Abbildung 23 zeigt beispielhaft einen hexaederförmigen Block inklusive beschrifteten Eckpunkten mittels ganzzahligen positiven Zahlen.

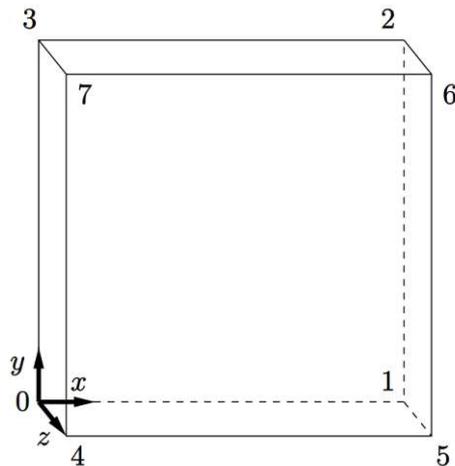


Abbildung 23: Geometrische Darstellung des Simulationsraumes; Hexaederförmiger Block mit beschrifteten Eckpunkten [44]

Eine „blockMeshDict“-Datei enthält üblicherweise Informationen zu sechs verschiedenen Schlüsselwörtern, die im Folgenden aufgelistet sind und anschließend beschrieben werden [44].

- convertToMeters
- vertices
- blocks
- edges
- boundary
- mergePatchPairs

Mit dem Zahlenwert nach dem Schlüsselwort „convertToMeters“ wird ein Skalierungsfaktor angegeben, mit dem alle Eckpunktkoordinaten in der Netzbeschreibung multipliziert werden. Ein Zahlenwert von z.B.: 0,001 skaliert die Koordinaten auf Millimeter. Unter dem Schlagwort „vertices“ wird eine Liste mit definierten Eckpunktkoordinaten eingetragen. Dabei entspricht der erste Listeneintrag dem Eckpunkt 0 und der n -te Listeneintrag dem Eckpunkt $n - 1$. In der Einstellung „blocks“ werden die Eckpunkte eines jeden hexaederförmigen Blocks in einer Liste geordnet, die Anzahl der Zellen des Netzes in jede Richtung mittels Vektor angegeben und eine Liste mit Expansionsverhältnissen der Zellen bestimmt. In der Kategorie „edges“ ist es möglich, gekrümmte Kanten zwischen zwei Eckpunkten zu beschreiben. Da in den durchgeführten Simulationen nur gerade Kanten definiert wurden, wird diese Einstellung nicht weiter ausgeführt. Die Grenzregionen des Netzes werden in einer Liste namens „boundary“ angegeben. Die Namensgebung jeder Grenzregion unterliegt dem Benutzer und sollte zweckmäßig gewählt werden, da diese Bezeichnungen für die Einstellungen der Randbedingungen der einzelnen Felddateien verwendet werden. Jeder Grenzregion wird weiters ein Typ und eine Liste von Blockflächen zugeteilt. Eine Blockfläche wird hierbei durch eine Liste von vier Eckpunkten des Blocks definiert. Die Reihenfolge, in der die Eckpunkte einer Fläche angegeben werden, ist so vorgegeben, dass die Fläche zunächst vom Inneren

des Blocks betrachtet wird. Es wird ein beliebiger Eckpunkt ausgewählt und die Eckpunkte der Fläche im Uhrzeigersinn durchlaufen. Abschließend können unter dem Schlüsselwort „mergePatchPairs“ nicht verbundene Grenzregionen zusammengeführt werden. Der Inhalt einer „blockMeshDict“-Datei ist beispielsweise im Anhang 14.1.1. zu sehen.

5.1.2. Vernetzungswerkzeug – snappyHexMesh

Das Vernetzungswerkzeug snappyHexMesh wird im Rahmen dieser Arbeit bei der Vernetzung von digitalisierten, komplexen, laserstrukturierten Oberflächen im STL-Format angewendet. Es ist in der Lage, automatisch dreidimensionale Netze, die Hexaederzellen und geteilte Hexaederzellen enthalten, aus triangulierten geometrischen Oberflächen im STL- oder OBJ-Format zu erstellen [44]. Dabei passt sich das Netz der vorgegebenen Oberfläche an, indem ein Ausgangsnetz iterativ verfeinert wird. Die notwendigen Einstellungen für die Anwendung dieses Werkzeugs werden im „snappyHexMeshDict“ im Verzeichnis „system“ vorgenommen. Zuvor ist es notwendig die zu vernetzende Oberfläche im geeigneten Format im Unterverzeichnis „triSurface“, welches sich im „constant“-Verzeichnis befindet, abzulegen. Außerdem bedarf es einer hexaederförmigen Basisvernetzung (Ausgangsnetz) mithilfe des blockMesh-Werkzeugs, welches den Umfang der Berechnungsdomäne definiert [44].

Die Einstellungen des „snappyHexMesh“-Vernetzungswerkzeuges unterteilen sich in fünf Kategorien (sub-dictionaries) namens „geometry“, „castellatedMeshControls“, „snapControls“, „addLayersControls“ und „meshQualityControls“. Am Beginn des Skripts können die Vernetzungsprozesse „castellatedMesh“, „snap“ und „addLayers“ jeweils mit einem Schalter aktiviert (true) oder deaktiviert (false) werden (siehe Abbildung 24).

Alle Oberflächen, die von snappyHexMesh verwendet werden, sind in der Kategorie „geometry“ angegeben. Jeder verwendeten geometrischen Fläche, wird ein benutzerdefinierter Name, ein Vernetzungstyp (type) und der Dateiname (file) der STL-Datei zugewiesen (siehe Abbildung 24). Weiters ist es möglich einen Skalierungsfaktor (scale) anzugeben, der mit allen Koordinatenpunkten der Fläche der STL-Datei multipliziert wird.

```
castellatedMesh true;
snap            true;
addLayers      false;

geometry
{
    laserstructured_surface
    {
        type    triSurfaceMesh;
        scale   0.001;
        file    "Geometrie.stl";
    }
};
```

Abbildung 24: Auswahl der durchzuführenden Vernetzungsprozesse und Spezifizierung der verwendeten Geometrien.

Im ersten Vernetzungsprozess („castellatedMesh“) werden mit einigen Parametern, die in der Kategorie „castellatedMeshControls“ definiert sind, die Verfeinerung des hexaederförmigen Ausgangsnetzes, welches den Feinheitsgrad null (level 0) aufweist, eingestellt. Abbildung 25 zeigt den Netzverfeinerungsvorgang einer Zelle von level 0 bis level 3. Es ist ersichtlich, dass sich die Zellenanzahl im Raum bei einer Netzverfeinerung um einen Feinheitsgrad auf das Achtfache vermehrt. Weiters ist mit einer steigenden Zellenanzahl auch eine längere Simulationszeit zu erwarten.

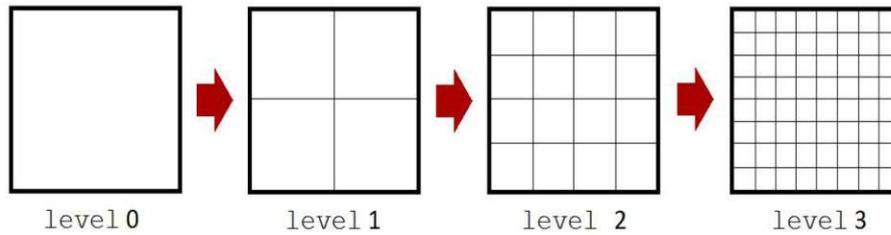


Abbildung 25: Ausmaß der Verfeinerungsschritte des Ausgangsnetzes [47]

Abbildung 26 zeigt beispielhaft den Aufbau der Kategorie „castellatedMeshControls“.

```
castellatedMeshControls
{
    maxLocalCells          70000000;
    maxGlobalCells        140000000;
    minRefinementCells    10;
    maxLoadUnbalance      0.1;
    nCellsBetweenLevels   2;

    features
    (
    );

    refinementSurfaces
    {
        laserstructured_surface
        {
            level (2 2);
            faceZone Top_Face;
            cellZone Top_Face;
            cellZoneInside inside;
        }

        laserstructured_surface
        {
            level (2 2);
            faceZone Bottom_Face;
            cellZone Bottom_Face;
            cellZoneInside inside;
        }
    }

    resolveFeatureAngle 25;

    refinementRegions
    {
    }

    locationInMesh (0.1305 0.0289 0.07677);

    allowFreeStandingZoneFaces false;
}
```

Abbildung 26: Übersicht der Parameter des Vernetzungsprozesses „castellatedMesh“

Der Parameter „maxLocalCells“ gibt die maximale Anzahl der Zellen pro Prozessor während des Verfeinerungsvorganges an. Mithilfe des Parameters „maxGlobalCells“ wird die Gesamtanzahl der Zellen während der Verfeinerung definiert. Wird dieser Zahlenwert während des Verfeinerungsprozesses überschritten, wird dieser sofort beendet. Die Verfeinerung des Netzes wird auch gestoppt, wenn die Anzahl der zu verfeinernden Zellen unter den Zahlenwert fällt, welcher durch den Parameter „minRefinementCells“ beschrieben wird. Mit dem „maxLoadUnbalance“-Wert wird die maximale Abweichung der Prozessorbalance in einem parallelen Vernetzungsprozess mit mehreren Prozessoren angegeben. Die Anzahl der Zellpufferschichten zwischen Zellschichten mit unterschiedlichem Vernetzungsgrad wird durch den Parameter „nCellsBetweenLevels“ definiert [44, 48].

Im „features“-Abschnitt können zuvor definierte Oberflächenmerkmale mittels „edgeMesh“-Dateien implementiert werden [44]. Da dieser und auch der „refinementRegions“-Parameter für die Simulationen der vorliegenden Arbeit nicht relevant sind, werden diese nicht näher erläutert. Der Abschnitt „refinementSurfaces“ enthält spezifische Angaben zur Netzverfeinerung verschiedener zuvor definierter Oberflächenregionen einer STL-Oberfläche. Diese Einstellung spielt eine entscheidende Rolle bei der Vernetzung von laserstrukturierten Oberflächen. Durch den Parameter „resolveFeatureAngle“ wird ein Grenzwinkel in Grad zwischen zwei lokalen Oberflächennormalen festgelegt, dessen Überschreitung zu einer lokalen Verfeinerung des Netzes führt. Dies ist speziell bei der Auflösung von spitzwinkligen Oberflächen hilfreich [49].

Abschließend erfolgt in der Kategorie „castellatedMeshControls“ der Prozess der Zellenentfernung. Dieser Prozess erfordert eine oder mehrere Regionen, die vollständig von einer begrenzenden Fläche innerhalb der definierten Domäne eingeschlossen sind. Die Region, deren Zellen beibehalten werden, wird durch einen Positionsvektor („locationInMesh“) innerhalb der Region identifiziert. An der Grenze dieser Region werden jene Zellen beibehalten, dessen Volumen sich zu einem Anteil von 50% oder mehr innerhalb dieser Region befinden. Alle Zellen, die diese Bedingung nicht erfüllen, werden entfernt [50]. Die Einstellung „allowFreeStandingZoneFaces“ bestimmt, ob die Erzeugung freistehender Zonenflächen erlaubt ist.

Der zweite Vernetzungsprozess namens „snap“ ist für das Verschieben der Eckpunkte der Zellen auf die Oberflächengeometrie verantwortlich, um die pixelförmige Oberfläche des ersten Vernetzungsprozesses zu entfernen bzw. zu glätten [50]. Für diesen Prozess werden die Einstellungen in der Kategorie „snapControls“ definiert. Abbildung 27 zeigt die relevanten Parameter für die Simulationen im Rahmen dieser Arbeit.

```

snapControls
{
    nSmoothPatch 6;
    tolerance 2;
    nSolveIter 30;
    nRelaxIter 7;
}

```

Abbildung 27: Parameter des Vernetzungsprozesses „snap“

Der Parameter „nSmoothPatch“ gibt die Anzahl der Glättungsiterationen an, bevor eine Übereinstimmung mit der Oberfläche gefunden wird. Das Verhältnis des Abstandes von Punkten, die von einer Oberflächenkante angezogen werden sollen, zur lokalen maximalen Kantenlänge wird durch den „tolerance“-Parameter bestimmt. Die Anzahl der Relaxations-Iterationen in Bezug auf die Netzverschiebung wird mit „nSolveIter“ und für den gesamten „snap“-Prozess mit „nRelaxIter“ festgelegt [44]. Abbildung 28a zeigt an einem „zweidimensionalen“ Beispiel das Ergebnis des auf die Ausgangsvernetzung angewendeten ersten Vernetzungsprozesses und die originale Oberfläche, die vereinfacht die Umriss eines Autos darstellt. Abbildung 28b zeigt die Veränderungen des zweiten Vernetzungsprozesses im Vergleich zum ersten.

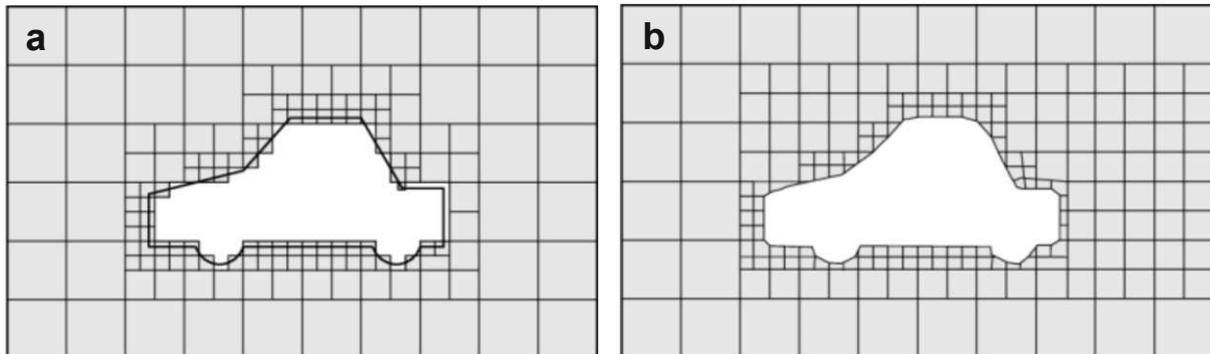


Abbildung 28: Zustand nach dem ersten Vernetzungsprozess „castellatedMesh“ (a); Zustand nach dem zweiten Vernetzungsprozess „snap“ (b) [44]

Im dritten und letzten Vernetzungsprozess namens „addLayers“ ist es möglich, lokal zusätzliche Schichten von hexaederförmigen Zellen an der Oberfläche zu generieren. Da dieses Vernetzungswerkzeug im Rahmen dieser Arbeit nicht zur Anwendung gekommen ist, wird auf dieses nicht weiter eingegangen.

In der letzten Kategorie der „snappyHexMeshDict“-Datei können Einstellungen bezüglich der Vernetzungsqualität vorgenommen werden [44]. Hierbei sind die Standardwerte der einzelnen Parameter nicht verändert worden, mit Ausnahme des „maxNonOrtho“-Parameters. Dieser gibt die maximale Nicht-Orthogonalität der Zellen in Grad an.

5.1.3. Stationäre und dynamische Netzverfeinerung

Das Vernetzungswerkzeug „dynamicMesh“ dient in der vorliegenden Arbeit dazu das Netz in definierten Regionen automatisch und gezielt zu verfeinern. Einerseits ist es möglich einen bestimmten Zellenbereich, welcher sich während der gesamten Simulation nicht ändert, gezielt zu verfeinern (stationäre Verfeinerung). Andererseits kann die Vernetzung an Phasengrenzen von Feldern, deren Position sich im Laufe der Simulation ändert, gezielt verfeinert werden (dynamische Verfeinerung). Abbildung 29 zeigt beispielhaft die Einstellungen eines Feldes einer „dynamicMeshDict“-Datei, die im „constant“-Verzeichnis zu finden ist. Die zu bestimmenden Parameter sind für beide Verfeinerungsarten ident.

```
{
    refineInterval      1;
    field               alpha.water;
    unrefineLevel       10;
    lowerRefineLevel    0.01;
    upperRefineLevel    0.95;
    maxRefinement        2;
    nBufferLayers        3;
}
```

Abbildung 29: Parameter einer gezielten Verfeinerung in der „dynamicMeshDict“-Datei

Der Parameter „refineInterval“ gibt an, nach wie viel Zeitschritten in der Simulation die Netzverfeinerung aktualisiert wird. Mit der Eingabe „field“ wird das gewünschte Feld ausgewählt, welches es zu vernetzen gilt. Eine gleichnamige Felddatei muss im Verzeichnis „0.orig“ vorhanden sein. Für jede Netzverfeinerung kann nur ein Feld angegeben werden. Wird der angegebene „unrefineLevel“-Grenzwert in einer Zelle unterschritten, so wird das Netz dieser Zelle vergrößert. Das Netz kann jedoch nicht gröber werden als das in der „blockMeshDict“-Datei definierte Ausgangsnetz. Das Netz einer Zelle wird in Bezug auf das angegebene Feld zwischen den Grenzwerten „lowerRefineLevel“ und „upperRefineLevel“ verfeinert. Der Parameter „maxRefinement“ gibt den maximalen Verfeinerungsgrad an, den die betreffenden Zellen annehmen können. Die Anzahl an Pufferschichten zwischen zwei Verfeinerungsgraden wird durch den „nBufferLayers“-Wert angegeben. Dieser definiert, wie viele Schichten es von einer Zellgröße geben muss, bevor die nächstgrößeren oder kleineren Zellen anschließen.

Ferner wird in dieser Datei die maximale Anzahl an Zellen für die Ausgangsdomäne angegeben. Somit kann nur solange eine Verfeinerung des Netzes stattfinden, solange die maximale Zellenanzahl unter diesem Grenzwert liegt. Außerdem wird mit einem Schalter namens „dumpLevel“ entschieden, ob die Verfeinerungsstufe einer jeden Zelle während der Simulation als „volScalarField“ dokumentiert werden soll. Dies ist für die Visualisierung im Post-Processing ein nützliches Werkzeug zur Fehlersuche [51]. Es ist anzumerken, dass jeweils eine „dynamicMeshDict“-Datei für den Pre-Processor (.preproc) als auch für die eigentliche Simulation (.orig) vorhanden ist.

5.2. Definition der Anfangs- und Randbedingungen

Die Anfangs- und Randbedingungen eines jeden Feldes in einem OpenFOAM-Case werden in einer jeweils eigenen Datei im ersten Zeitverzeichnis „0.orig“ definiert. Dieses Zeitverzeichnis dient als Backup und wird daher nie überschrieben. Der Inhalt einer derartigen Datei ist beispielhaft in Abbildung 30 zu sehen.

```
18 dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];      // [kg m s K mol A cd]
19
20 internalField   uniform (0 0 0);
21
22 boundaryField
```

Abbildung 30: Festlegung der Dimension, der Anfangs- und Randbedingungen eines jeden Feldes

Zunächst wird die Zuweisung einer Dimension mit Bezug auf Basiseinheiten vorgenommen. Da OpenFOAM kein spezielles Einheitensystem vorgibt, wurden für die vorliegende Arbeit das SI-Einheitensystem, welches aus sieben Basiseinheiten besteht, gewählt. Die Dimensionspositionen werden mit ganzzahligen positiven und negativen Zahleneinträgen definiert, die den Wert des Exponenten einer Basiseinheit festlegen. Weiters wird nach dem Schlagwort „internalField“ festgelegt, welcher Wert dem Feld anfangs zugewiesen wird. Für diese Arbeit wurde allen Elementen innerhalb des Feldes ein einheitlicher Wert (uniform) zugewiesen. Zuletzt werden noch die Randbedingungen der Felder an den, in der „blockMeshDict.block3D“-Datei, definierten Grenzregionen (boundary patches) festgelegt. Hierbei wird für jede Grenzregion ein, den Anforderungen entsprechender, Randbedingungstyp (type) und eventuell weitere typabhängige Werte gewählt.

5.3. Festlegung der Materialeigenschaften

Die Materialeigenschaften der drei Phasen (Gas, Flüssigkeit und Festkörper) werden in den dazugehörigen Input-Dateien (z.B.: air.inp, water.inp, AISI304.inp) im Verzeichnis „./constant/materials“ festgelegt. Für jede Phase können die physikalischen Eigenschaften für jeden Aggregatzustand definiert werden. Da in den Simulationen im Rahmen der vorliegenden Arbeit eine konstante Temperatur vorgegeben wird, kommt es zu keinem Wechsel des Aggregatzustandes einer Phase und die Materialeigenschaften müssen nur für den anfangs vorgegebenen Aggregatzustand definiert werden. Weiters wird für jede physikalische Größe ein Model (= Formel) bestimmt, dessen unbekannte Variablen in Dimension und Wert anschließend definiert werden.

Von großer Bedeutung ist neben der Eingabe der Dichte, des Elastizitätsmoduls und der kinematischen Viskosität, die Möglichkeit der Implementierung von dispersiven und polaren Oberflächenenergieanteilen der jeweiligen Phase (siehe Abbildung 31). Mit der Vorgabe der Anteile der Oberflächenenergie ist es möglich, mithilfe der im Solver vorgegebenen Formel für

die Grenzflächenenergie nach OWRK, diese zu berechnen. Es wird somit kein sich einstellender Kontaktwinkel vorgegeben.

```
surfaceEnergyModel simplePolar;  
  
    simplePolarSurfaceEnergyCoeffs  
  
    {  
        sigma          0.0218;    // dispersiver Anteil  
        sigmaPolar     0.0510;    // polarer Anteil  
    }
```

Abbildung 31: Implementierung von dispersivem und polarem Oberflächenenergieanteil einer Phase

In der „transportProperties“-Datei wird auf die zuvor definierten Materialeigenschaften der Input-Dateien zugegriffen und diese den einzelnen Phasen zugeordnet.

5.4. Input & Output Steuerung

Zeiteinstellungen und Einstellungen bezüglich der Erstellung von Output-Dateien für die Simulation werden in der Datei „controlDict.orig“ vorgenommen. Für den Pre-Processor ist eine gleichnamige Datei mit der Endung „.preprog“ vorhanden. Abbildung 32 zeigt beispielhaft die enthaltenen Parameter einer „controlDict“-Datei.

```
18 application          multiphaseInterDyMLaserFoam-droplet;  
19  
20 startFrom            latestTime;  
21  
22 startTime            0;  
23  
24 stopAt               endTime;  
25  
26 endTime              0.0005;  
27  
28 deltaT               1e-6;  
29  
30 writeControl         runtime;  
31  
32 writeInterval        0.000005;  
33  
34 purgeWrite          0;  
35  
36 writeFormat          binary;  
37  
38 writePrecision       10;  
39  
40 writeCompression    uncompressed;  
41  
42 timeFormat           general;  
43  
44 timePrecision        10;  
45  
46 runtimeModifiable   yes;  
47  
48 adjustTimeStep       yes;  
49  
50 maxCo                1.0;  
51  
52 maxDeltaT            1e-5;
```

Abbildung 32: Parameter einer „controlDict“-Datei

Der erste Eintrag (Abb. 32, Zeile 18) „application“ gibt den verwendeten Solver an. Die Zeit-Parameter (Zeilen 20-28) definieren die Start- (startFrom, startTime) und Endzeit (stopAt, endTime), sowie die Dauer eines Zeitschritts (deltaT). Danach folgen Einstellungen bezüglich

des Erstellens von Output-Dateien mit Daten der Simulation (Zeilen 30-40). Es werden unter anderem die Zeitpunkte des Datenschreibens (`writeControl`, `writeInterval`), das Output-Format (`writeFormat`) und die Schreibpräzision (`writePrecision`) festgelegt. Es folgt ein Parameter (`timeFormat`), der das Format der Benennung der Zeit-Verzeichnisse steuert und ein Eintrag (`timePrecision`), der die Präzision der Zeitschritte angibt. Die letzten Parameter von Abbildung 32 (Zeilen 46-52) dienen unter anderem dazu die Stabilität einer Simulation zu verbessern.

5.5. Auswahl der Diskretisierungsmodelle

In der Datei „fvSchemes“ im „system“-Verzeichnis wird das Diskretisierungsschema für jeden Term der maßgeblichen Gleichungen einer Simulation festgelegt [44, 52]. Es wird zwischen sechs verschiedenen Term-Kategorien unterschieden (`ddtSchemes`, `gradSchemes`, `divSchemes`, `laplacianSchemes`, `interpolationSchemes`, `snGradSchemes`). Jede Kategorie enthält einen Standardeintrag (`default`), der für alle gleichartigen Terme gültig ist. Einzelnen Termen einer Kategorie kann auch gesondert ein Diskretisierungsschema zugeordnet werden, welches den Standardeintrag (`default`) ersetzt.

In der Kategorie „`ddtSchemes`“ werden jene Terme diskretisiert, welche eine Zeitableitung ($\partial/\partial t$) enthalten. Ausdrücke, die einen Gradienten (∇) beinhalten werden der Kategorie „`gradSchemes`“ zugeordnet. Divergenz-Terme ($\nabla \cdot$) bekommen in der Kategorie „`divSchemes`“ ein Diskretisierungsmodell zugewiesen. Jene Terme mit Laplace-Operator (∇^2) werden in der Kategorie „`laplacianSchemes`“ diskretisiert. In der Klasse „`interpolationSchemes`“ wird festgelegt, mit welcher Methode verschiedene Werte (z.B.: Geschwindigkeitswerte) einer Zelle vom Volumsmittelpunkt auf deren Flächenmittelpunkte interpoliert werden. Diskretisierungsschemata für Gradientenanteile, die normal zur Zellenoberfläche stehen (`surface normal gradient`) werden in der Kategorie „`snGradSchemes`“ definiert.

5.6. Lösungs- und Algorithmussteuerung

Gleichungslöser, Toleranzen und weitere Algorithmuskontrollen werden in der „fvSolution“-Datei im „system“-Verzeichnis definiert [44]. Diese Datei enthält die drei Kategorien „`solvers`“, „`relaxationFactors`“ und „`PISO`“, „`SIMPLE`“ oder „`PIMPLE`“. In der Kategorie „`solvers`“ werden jene lineare Löser spezifiziert, die für das Lösen der diskretisierten Gleichungen angewendet werden. Als linearer Löser wird in dieser Datei die Methode der Zahlenverarbeitung zum Lösen einer Matrixgleichung bezeichnet. Jeder Eintrag innerhalb der „`solvers`“-Kategorie beginnt mit dem Namen der Variable, welche in einer bestimmten Gleichung gelöst wird. Danach werden der Lösertyp (`solver`) und spezifische Parameter (`preconditioner`, `tolerance`, `relTol`, `maxIter`) für den Löser definiert.

In der zweiten Kategorie werden ein Algorithmus, der ein iteratives Verfahren zur Koppelung von Gleichungen für Impuls- und Massenerhaltung darstellt, und zugehörige Parameter vorgegeben. Während der „SIMPLE“ (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) - Algorithmus bei Gleichgewichtszuständen angewendet wird, kommen die beiden Algorithmen „PISO“- (Pressure-Implicit Split-Operator) und „PIMPLE“, der eine Kombination aus „PISO“ und „SIMPLE“ ist, bei transienten Problemen zum Einsatz. Mithilfe der Vorgabe von Entspannungsfaktoren in der Kategorie „relaxationFactors“, ist es möglich die Stabilität einer Berechnung zu verbessern, indem der Betrag begrenzt wird, um den sich eine Variable von einer Iteration zur nächsten ändern darf.

5.7. Feldzuweisung

Die Zuweisung der zuvor definierten Phasen auf einen Satz von Zellen wird in der Datei „setFieldsDict“ im Verzeichnis „system“ festgelegt. Es existiert sowohl eine Datei für den Pre-Processor (.preprog) als auch für die Simulation (.orig). Weiters wird dieses Werkzeug auch dafür verwendet werden, die Position von stationären Netzverfeinerungen zu bestimmen. Zunächst werden in der Kategorie „defaultFieldValues“ Anfangswerte der einzelnen Phasen für das gesamte Netz festgelegt. In der Kategorie „regions“ können Zellenbereiche im Netz bestimmt werden, die mit neu definierten Phasenwerten überschrieben werden. Auf diese Weise konnte in den, im Rahmen dieser Arbeit, durchgeführten Simulationen, die Positionen der Gasphase, des Wassertropfens und der Festkörperoberfläche festgelegt werden.

5.8. Weitere Einstellungen

Um eine OpenFOAM-Simulation zeitsparend auf mehreren Prozessoren parallel durchzuführen, müssen Einstellungen bezüglich der Aufteilung der Domäne (Vernetzung und Felder) bestimmt werden [44]. Diese werden in der Datei „decomposeParDict.orig“ im Verzeichnis „system“ vorgenommen. Der Benutzer wählt zunächst die Anzahl an Subdomänen, in die die gesamte Domäne aufgeteilt wird. Diese Anzahl entspricht der Zahl der Prozessoren, die für die Simulation zur Verfügung stehen. Anschließend wird eine von vier Zerlegungsmethoden ausgewählt und ein Satz von zugehörigen Koeffizienten festgelegt. Ziel ist es, die Domäne mit minimalem Aufwand so aufzuteilen, dass eine effiziente Simulation gewährleistet werden kann. In der „writeObjects“-Datei im Verzeichnis „system“ wird festgelegt, welche Objekte (z.B.: Felder) bei jedem Zeitschritt der Simulation erfasst werden. Diese müssen in der Datenbank des vorliegenden Cases vorhanden sein und können im Post-Processing visualisiert werden.

Die Gravitationsbeschleunigung ist in der gesamten Domäne konstant und wird in der Datei namens „g“ im „constant“-Verzeichnis definiert [44]. Diese Größe ist ein „uniformDimensioned-VectorField“ und beinhaltet neben der Dimension einer Beschleunigung, einen Wert in Vektorform. In der „modelProperties“-Datei, welches sich im „constant“-Verzeichnis befindet, können Modellparameter, die den verwendeten Solver beeinflussen, durch den Benutzer festgelegt und bei Bedarf geändert werden. Die Modellierung von Verwirbelungen (turbulence modelling) wird in der Datei „turbulenceProperties“ im „constant“-Verzeichnis definiert. Neben der Festlegung einer Modellierungsart, werden auch zugehörige Modellierungsparameter bestimmt.

5.9. Starten und Stoppen einer Simulation

Zum Starten einer Simulation wird ein Terminalfenster im Case-Verzeichnis geöffnet. Durch das Ausführen des Befehles „./Allprepare.sh“ wird das namensgleiche Shell-Script ausgeführt. Ein Shell-Script beinhaltet alle Befehle, die zum Starten einer Simulation notwendig sind, sodass nicht alle Befehle einzeln vom Benutzer in die Konsole eingegeben werden müssen. Das Allprepare-Shell-Script aktiviert einen Pre-Processor, der für die Verfeinerung des Netzes vor der eigentlichen Simulation benötigt wird. Alle Dateien, die den Pre-Processor beeinflussen haben die Endung „.preproc“. Dieser Schritt kann auch parallel durch die Verwendung mehrerer Prozessoren ausgeführt werden. Der Befehl „./Allprepare.sh 4“ gibt zum Beispiel vor, dass vier Prozessoren gleichzeitig für den Prozess verwendet werden sollen. Nach erfolgreicher Ausführung des Pre-Processors kann die Netzverfeinerung mittels ParaView überprüft werden. Danach wird der Simulations-Case durch den Befehl „./Allprepare2.sh“ bereinigt und für die Simulation vorbereitet. Falls der Pre-Processor parallel mit mehreren Prozessoren ausgeführt wurde, muss in diesem Schritt wieder die gleiche Anzahl an Prozessoren verwendet werden.

Um eine Simulation, die bei der Verwendung des Pre-Processors nur einen Prozessor verwendet hat, zu starten, wird der Befehl „./resumeSingleRun.sh“ ausgeführt. Für eine parallellaufende Simulation, die auch schon beim Pre-Processor-Schritt mehrere Prozessoren beansprucht hat, wird der Befehl „./resumeParallelRun.sh“ verwendet.

Mit der Eingabe „./stopSimulation.sh“ im Terminal im Case-Verzeichnis kann eine laufende Simulation unterbrochen werden. Der Befehl „./Allclean.sh“ löscht alle Simulationsdaten und setzt alle Verzeichnisse auf den Ausgangszustand zurück.

5.10. Erstellung einer Animation

Nach der Durchführung einer Simulation werden die Ergebnisse mit dem Post-Processing-Programm ParaView visualisiert. Sind die Simulationsergebnisse zufriedenstellend und ist eine passende Ansicht gewählt, können Bilder der Ergebnisse der einzelnen Zeitschritte in einem Verzeichnis (movie) im Case-Verzeichnis abgespeichert werden. Durch Ausführen des Befehls „./Makemovie.sh“ wird ein Video als mp4-Datei im Case-Verzeichnis erstellt.

Die im Programm ParaView eingestellten Zustände bzw. Ansichten können in sogenannten „ParaView State Files“ mit der Endung „.pvsm“ abgespeichert werden.

6. Solver-Beschreibung

Als Solver wurde die „multiphaseInterDyMLaserFoam“-Anwendung, welche von der Forschungsgruppe Prozesssimulation (unter Leitung von Prof. Otto) des Instituts für Fertigungstechnik und photonische Technologien der TU-Wien, entwickelt wurde, verwendet. Diese Anwendung dient zur Simulation lasergestützter Prozesse und es ist möglich mehrere Phasen (Materialien) in verschiedenen Aggregatzuständen zu implementieren. Ferner können Mehrphasenströmungen insbesondere auf deren Kompressibilität und Aggregatzustandsänderung untersucht werden. Der im Rahmen dieser Arbeit verwendete Solver, basiert auf dem „multiphaseInterFoam“-Standard-Solver von OpenFOAM, der eine Erweiterung des bekannten „interFoam“-Solvers um n Phasen ist [53].

In der vorliegenden Arbeit wird ein „Mischungsmodell“ für das strömungsmechanische Mehrphasenproblem angewendet. Für dieses Modell ist das Lösen der Navier-Stokes-Gleichungen für eine Mischung aus n Phasen notwendig. Da bei den hier im Rahmen dieser Arbeit, durchgeführten Simulationen die Temperatur als konstant angenommen wird, ändert sich der Aggregatzustand der Phasen während der Simulation nicht.

Zunächst werden die Kontinuitätsgleichung (Gleichung 21) und die Impulsbilanz (Gleichung 22) beschrieben:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \quad (\text{Gl. 21})$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_S + \mathbf{F}_D \quad (\text{Gl. 22})$$

Hierbei entspricht \mathbf{u} dem Geschwindigkeitsvektor, p dem Druck, ρ der Dichte und $\boldsymbol{\tau}$ dem viskosen Spannungstensor der Phasenmischung. Weiters steht \mathbf{F}_B für die Volumenkräfte aufgrund der Schwerkraft, \mathbf{F}_S für die Oberflächenkräfte aufgrund der Oberflächenspannung und \mathbf{F}_D repräsentiert jenen Term, der für die Bewegungseinschränkung von Festkörpern verantwortlich ist [518]. Der Term \mathbf{F}_D ist aus der Carman-Kozeny Gleichung für Strömungen in porösen Medien (Darcy-Gesetz) abgeleitet und wird folgendermaßen beschrieben [54, 55]:

$$\mathbf{F}_D = -\frac{\mu}{A_{perm}} \cdot \frac{\alpha_{solid}^2}{(1 - \alpha_{solid})^3 + \delta} \cdot \mathbf{u} \quad (\text{Gl. 23})$$

Das poröse Medium stellt in den Simulationen den Festkörper dar. Dabei steht α_{solid} für den Volumenanteil eines festen Materials und μ für die Viskosität der Phasenmischung. A_{perm} ist die Durchlässigkeitsfläche des porösen Mediums und wird mit einem Wert von $\sim 10^{-13} \text{ m}^2$ definiert. Um eine Division durch den Wert Null zu vermeiden, ist im Nenner die sehr kleine Konstante $\delta = 10^{-6}$ zu finden.

Die Grenzflächenenergien $\sigma_{i,j}$ an den Grenzen zweier Phasen werden mithilfe der Oberflächenenergien der beteiligten Phasen (σ_i bzw. σ_j) berechnet, wobei eine Aufteilung in einen dispersiven (σ_i^D bzw. σ_j^D) und polaren (σ_i^P bzw. σ_j^P) Anteil erfolgt (OWRK-Methode, siehe Kapitel 3.3.1):

$$\sigma_{i,j} = \sigma_i + \sigma_j - 2 \cdot \left(\sqrt{\sigma_i^D \cdot \sigma_j^D} + \sqrt{\sigma_i^P \cdot \sigma_j^P} \right) \quad (\text{Gl. 24})$$

Daraus ist es möglich die Oberflächenspannungskraft F_S zu ermitteln:

$$\mathbf{F}_S = \sum_{i,j \forall i \neq j} \nabla \cdot [\sigma_{i,j} \cdot (\alpha_j \nabla \alpha_i - \alpha_i \nabla \alpha_j)] \quad (\text{Gl. 25})$$

α_i bzw. α_j stehen hier für den Volumenanteil der beiden beteiligten Phasen. Dieses Modell hat den Vorteil, dass nur die Parameter der Oberflächenenergiewerte der einzelnen Phasen vorgegeben werden und der Kontaktwinkel zwischen zwei Phasen das Ergebnis der Simulation ist. Dies steht im Gegensatz zu verbreiteten Modellen, wie zum Beispiel dem Volume-of-Fluid Standardsolver „interFoam“ von OpenFOAM-6. Bei diesem müssen die sich einstellenden Kontaktwinkel für die einzelnen Phasenpaare zuvor angegeben werden.

Die meisten kommerziellen Systeme zum Lösen dynamischer Strömungsprobleme berechnen die Oberflächenspannung durch das Analysieren der Krümmung der Oberfläche und betrachten Oberflächenkräfte als radiale Kräfte, die senkrecht auf die Oberfläche wirken. Tatsächlich wirkt die Oberflächenspannung tangential in der Oberfläche und es wird versucht die Oberflächenenergie des gesamten Systems zu minimieren. Auf gekrümmten Oberflächen (z.B.: Flüssigkeitstropfen) führen die resultierenden Tangentialspannungen zu den bereits erwähnten Oberflächennormalkräften. Jedoch lassen sich Benetzungsphänomene an Festkörperoberflächen so nicht beschreiben. Daher wurde ein Ansatz implementiert, der es ermöglicht, sowohl radiale Oberflächenkräfte als auch Benetzungsphänomene mit einem gemeinsamen theoretischen Ansatz zu ermitteln [56].

Die Volumenkräfte F_B sind neben dem Vektor der Schwerkraft \mathbf{g} , auch von der relativen Höhe h (parallel zur Richtung von \mathbf{g}) und der Dichte ρ abhängig:

$$\mathbf{F}_B = \mathbf{g} \cdot h \nabla \rho \quad (\text{Gl. 26})$$

7. Benetzung von ebenen Oberflächen

Nach der näheren Erläuterung der Grundlagen, des Aufbaus und der Eingabe einer Simulation mittels OpenFOAM in den Kapiteln 5 und 6, werden in diesem Kapitel zunächst Kontaktwinkelmessungen auf ebenen Oberflächen unterschiedlicher Materialien erläutert und mit den dazugehörigen Simulationsergebnissen verglichen. Die Untersuchung von ebenen Oberflächen diene vorerst zur Validierung, ob die in der Simulation angewendete Theorie nach OWRK vom Solver richtig ausgeführt wurden. Zunächst werden in diesem Kapitel der Aufbau, die Durchführung und die Ergebnisse der experimentellen Versuche erläutert. Mithilfe dieser experimentellen Kontaktwinkelmessungen konnten die unbekanntenen Oberflächenenergien der verschiedenen Festkörpermateriale nach der in Kapitel 3.3.1 beschriebenen OWRK-Methode bestimmt und in die Simulation implementiert werden. Anschließend werden die Einstellungen der durchgeführten Simulationen näher erläutert und die Ergebnisse der Simulationen und der Versuche verglichen.

7.1. Experimentelle Versuche

7.1.1. Aufbau und Durchführung

Die optischen Messungen der Kontaktwinkel von Flüssigkeitstropfen auf ebenen Oberflächen verschiedener Werkstoffe wurden mittels der Methode des liegenden Tropfens (Sessile-Drop Methode) durchgeführt. Bei dieser Methode wird ein Tropfen einer Flüssigkeit mittels Kanüle punktgenau auf eine Festkörperoberfläche abgesetzt. Die Dosierung erfolgt computer-gesteuert und es wurde ein Tropfenvolumen zwischen 1-10 μl gewählt. Für die Bestimmung aller Kontaktwinkel in der vorliegenden Arbeit, wurde das Goniometer OCA25 von DataPhysics verwendet (siehe Abbildung 33).

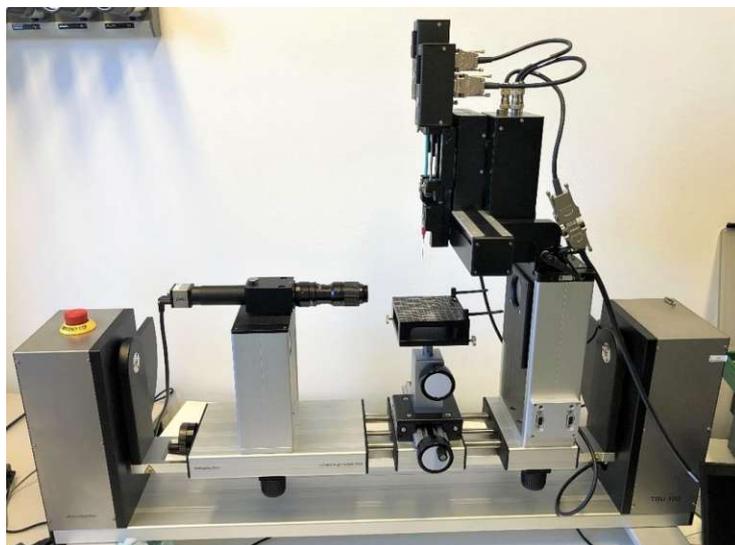


Abbildung 33: Kontaktwinkelmessgerät OCA 25 von DataPhysics

Abbildung 34 stellt den Aufbau dieses Kontaktwinkelmessgerätes schematisch dar. Der Probenstisch (grün) des OCA25 lässt sich entlang von Präzisionsachsen mit Handrädern manuell exakt ausrichten. Mit der eingebauten Hochleistungskamera mit 6,5-fachem Zoomobjektiv (rot) und USB 3-Interface können einerseits sehr schnell ablaufende Prozesse beobachtet und andererseits hochauflösende Bilder erstellt werden. Die exakte Flüssigkeitsdosierung wird durch elektronische Direktdosiersysteme (blau) bewerkstelligt [43].

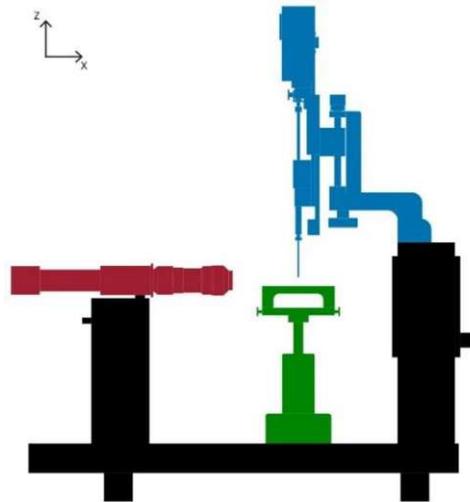


Abbildung 34: Schematischer Aufbau des OCA 25 Kontaktwinkelmessgerätes [57]

Für die Versuche wurden als Festkörpermaterialien Edelstahl (EN 1.4301 / AISI 304), eine Aluminiumlegierung (AlMgSi 0,5), Kupfer, Messing, Glas und Polystyrol (PS) gewählt (siehe Abbildungen 35 und 36). Es ist anzumerken, dass die metallischen Materialien zuvor auf einer Seitenhälfte poliert wurden, um eine möglichst ebene Oberfläche zu erhalten. Als Flüssigkeiten wurden Wasser (H_2O) und das rein disperse Diiodmethan (CH_2I_2) herangezogen.

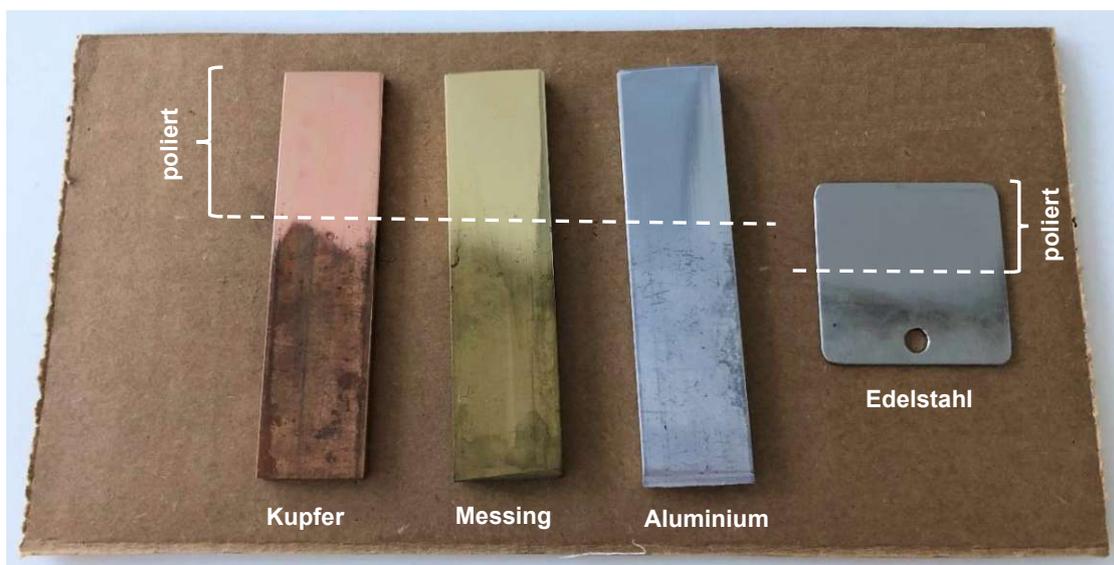


Abbildung 35: Polierte metallische Proben (Kupfer, Messing, Aluminium, Edelstahl)



Abbildung 36: Einmal-Küvette aus Polystyrol (oben); Glasplatte (unten)

Abbildung 37a zeigt schematisch den Dosiervorgang eines Flüssigkeitstropfens auf eine Festkörperoberfläche. Dabei wird der Flüssigkeitstropfen zunächst am Ende der Kanüle dosiert und danach durch eine vertikale Verschiebung des Probenstückes in Kontakt mit der Festkörperoberfläche gebracht. In Abbildung 37b sind bereits mehrere Tropfen auf einer polierten metallischen Oberfläche platziert worden.

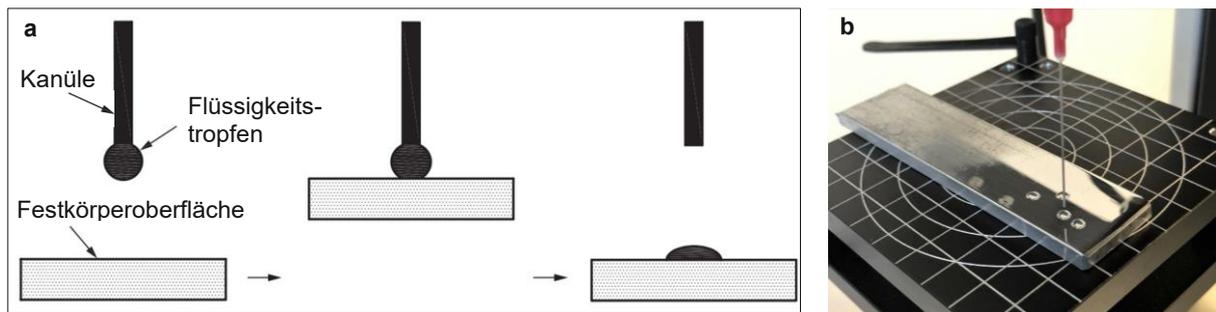


Abbildung 37: Platzierung von Flüssigkeitstropfen auf einer Probenoberfläche: Dosiervorgang (a) [58], im Experiment (b)

Mit der dazugehörigen Bildanalysesoftware (SCA20) wird der Kontaktwinkel aus dem Schattenbild eines auf der zu untersuchenden Oberfläche liegenden Flüssigkeitstropfens bestimmt. Anhand dieses Bildes ist es möglich, die Basislinie manuell zu ermitteln. In einer zweidimensionalen Projektion des liegenden Flüssigkeitstropfens, ist die Basislinie die gerade Grenzlinie zwischen dem Flüssigkeitstropfen und der Oberfläche des Festkörpers (siehe Abbildung 38). Wegen der reflektierenden Eigenschaften polierter metallischer Festkörperoberflächen, wird die Basislinie durch die Grenzlinie zwischen dem Tropfen und seinem Spiegelbild gewählt. Anschließend wird die Tropfenkontur zum Beispiel durch eine geometrische Funktion mit polynomem Ansatz angepasst und der Kontaktwinkel mithilfe einer Tangente an diese geometrische Funktion am Dreiphasenpunkt ermittelt (siehe Abbildung 38). Dabei ist anzumerken, dass der Kontaktwinkel an beiden Dreiphasenpunkten gemessen wird und es daher zwei Ergebnisse pro Messung gibt. Aus diesen wird der Mittelwert errechnet und in die Ergebnistabelle eingetragen [59, 60, 61].

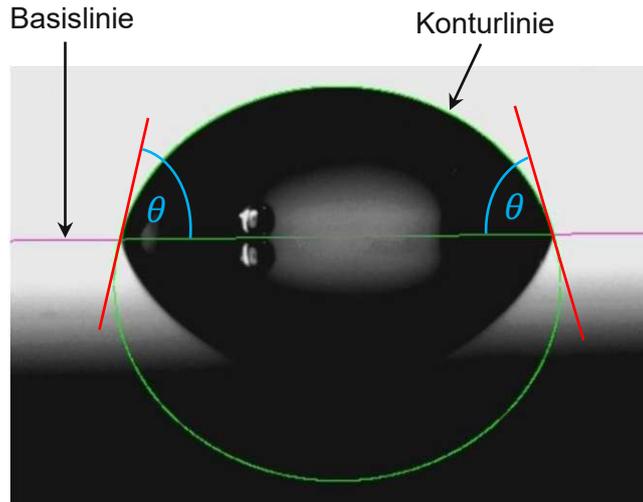


Abbildung 38: Schattenbild eines Flüssigkeitstropfens auf reflektierender Festkörperoberfläche mit Kennzeichnung von Basislinie, Konturlinie und Kontaktwinkel [59]

7.1.2. Experimentelle Ergebnisse

Im Zuge der Kontaktwinkelmessungen mit einem Wassertropfen (θ_{H_2O}) wurden jeweils fünf Einzelmessungen mit einem Tropfenvolumen von 10 μl durchgeführt. In Tabelle 2 sind die Messergebnisse, die berechneten arithmetischen Mittelwerte (\bar{x}) und mittleren absoluten Abweichungen vom arithmetischen Mittelwert ($d_{\bar{x}}$) zusammengefasst.

Tabelle 2: Gemessene Kontaktwinkel von verschiedenen Materialoberflächen mit einem Wassertropfen

Kontaktwinkel mit Wasser (θ_{H_2O}) [°]						
Messung	Aluminium	Edelstahl	Kupfer	Messing	Glas	Polystyrol
1	82,5	96,5	82,0	96,5	40,5	95,0
2	88,5	96,0	93,0	97,5	46,5	89,5
3	92,5	94,0	93,0	101,5	46,0	97,5
4	93,5	95,5	92,5	96,0	44,5	96,0
5	91,0	95,5	96,5	100,0	44,0	92,0
$\bar{x} \pm d_{\bar{x}}$	89,6 ± 3,3	95,5 ± 0,6	91,4 ± 3,8	98,3 ± 2,0	44,3 ± 1,6	94,0 ± 2,6

Es ist zu sehen, dass die Werte je Material nur geringfügig voneinander abweichen. Die gemessenen Kontaktwinkel an der polierten Messingoberfläche sind am größten, während jene an der Glasplatte am niedrigsten sind. Die Glasplatte ist die einzige der ausgewählten Materialproben, welche eindeutig als hydrophil ($\theta_{H_2O} < 90^\circ$) bezeichnet werden kann. Alle anderen Materialoberflächen können als schwach hydrophob eingeordnet werden. Die folgenden Abbildungen 39-44 zeigen die Schattenbilder der gemessenen Kontaktwinkel der ausgewählten Materialoberflächen mit einem Wassertropfen.

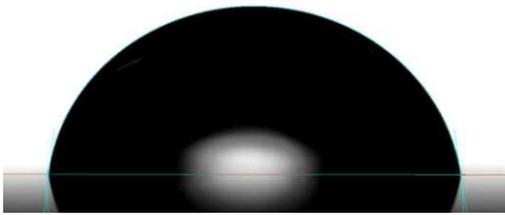


Abbildung 39: Wassertropfen auf der Aluminiumlegierungsoberfläche (Messung 1)

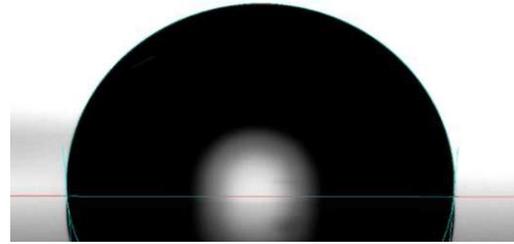


Abbildung 40: Wassertropfen auf der Edelstahloberfläche (Messung 2)

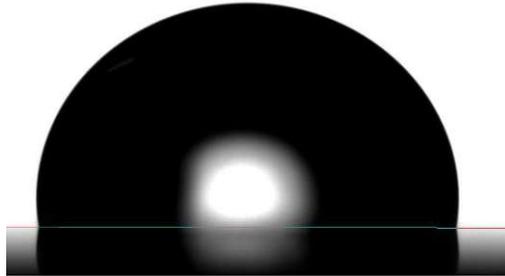


Abbildung 41: Wassertropfen auf der Messingoberfläche (Messung 5)

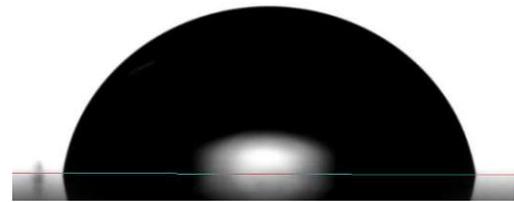


Abbildung 42: Wassertropfen auf der Kupferoberfläche (Messung 1)



Abbildung 43: Wassertropfen auf der Glasoberfläche (Messung 3)

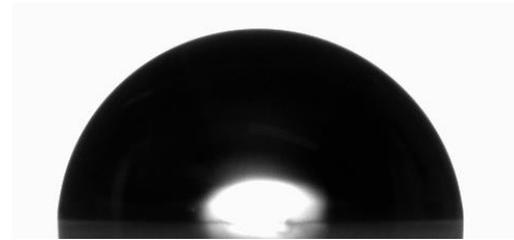


Abbildung 44: Wassertropfen auf der Polystyroloberfläche (Messung 3)

Die folgende Tabelle 3 enthält die Ergebnisse der durch die Bildanalysesoftware bestimmten Kontaktwinkel der Festkörperoberflächen mit einem Diiodmethantropfen.

Tabelle 3: Gemessene Kontaktwinkel von verschiedenen Materialoberflächen mit einem Diiodmethantropfen

Kontaktwinkel mit Diiodmethan ($\theta_{CH_2I_2}$) [°]						
Messung	Aluminium	Edelstahl	Kupfer	Messing	Glas	Polystyrol
1	59,0	70,5	70,0	71,0	46,0	33,0
2	58,0	72,5	75,0	74,5	53,5	26,0
3	61,0	74,5	74,0	74,5	53,5	36,5
$\bar{x} \pm d_{\bar{x}}$	59,3 ± 1,1	72,5 ± 1,3	73,0 ± 2,0	73,3 ± 1,6	51,0 ± 3,3	31,8 ± 3,9

Es ist zu erkennen, dass alle Oberflächen mit einem Diiodmethantropfen ein hydrophiles Benetzungsverhalten aufweisen. Die gemessenen Kontaktwinkel der polierten Oberflächen der Materialien Edelstahl, Kupfer und Messing mit Diiodmethan sind sehr ähnlich und liegen im Bereich von 70° und 75°. Im Vergleich dazu weist die Oberfläche der Aluminiumprobe einen Kontaktwinkel von ca. 60° auf und jener der Glasoberfläche liegt im Bereich von 50°. Die

Kontaktwinkelwerte der Polystyroloberfläche mit einem Diiodmethantropfen sind am geringsten und liegen bei ungefähr 32° . Im Vergleich zu den Versuchen mit einem Wassertropfen ergeben sich bei allen Materialien niedrigere Kontaktwinkel mit Ausnahme von Glas. Die Kontaktwinkel von Glas mit einem Diiodmethantropfen sind um ungefähr 15% höher als jene mit einem Wassertropfen. Die folgenden Abbildungen 45-50 zeigen die Schattenbilder der gemessenen Kontaktwinkel von ausgewählten Materialoberflächen mit einem Diiodmethantropfen.

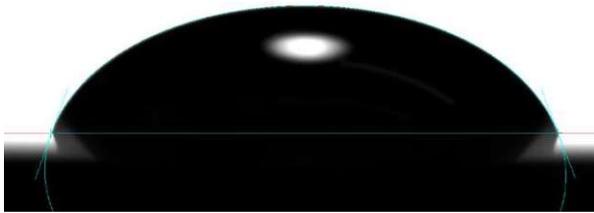


Abbildung 45: Diiodmethantropfen auf der Kupferoberfläche (Messung 1)



Abbildung 46: Diiodmethantropfen auf der Aluminiumoberfläche (Messung 2)

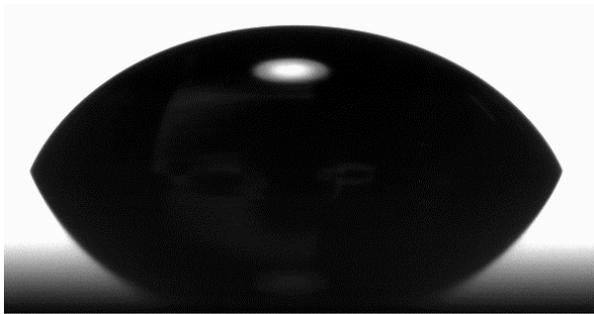


Abbildung 47: Diiodmethantropfen auf der Edelstahloberfläche (Messung 2)

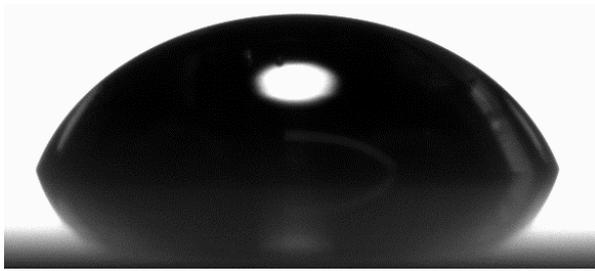


Abbildung 48: Diiodmethantropfen auf der Messingoberfläche (Messung 1)

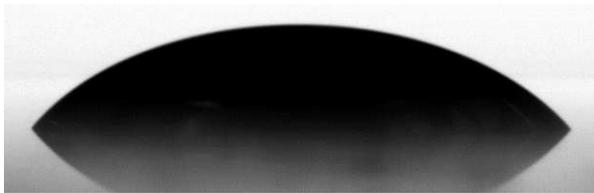


Abbildung 49: Diiodmethantropfen auf der Glasoberfläche (Messung 3)

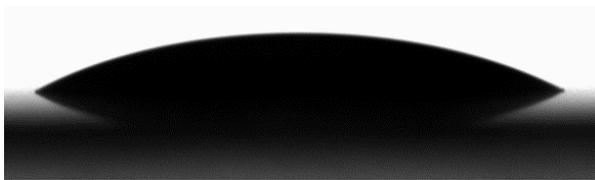


Abbildung 50: Diiodmethantropfen auf der Polystyroloberfläche (Messung 2)

Abbildung 51 stellt die Mittelwerte der Kontaktwinkel zwischen den verschiedenen Materialoberflächen und einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen grafisch gegenüber. Es ist zu sehen, dass - mit Ausnahme von Glas - die Oberflächen mit einem Diiodmethantropfen besser benetzbar sind als mit einem Wassertropfen.

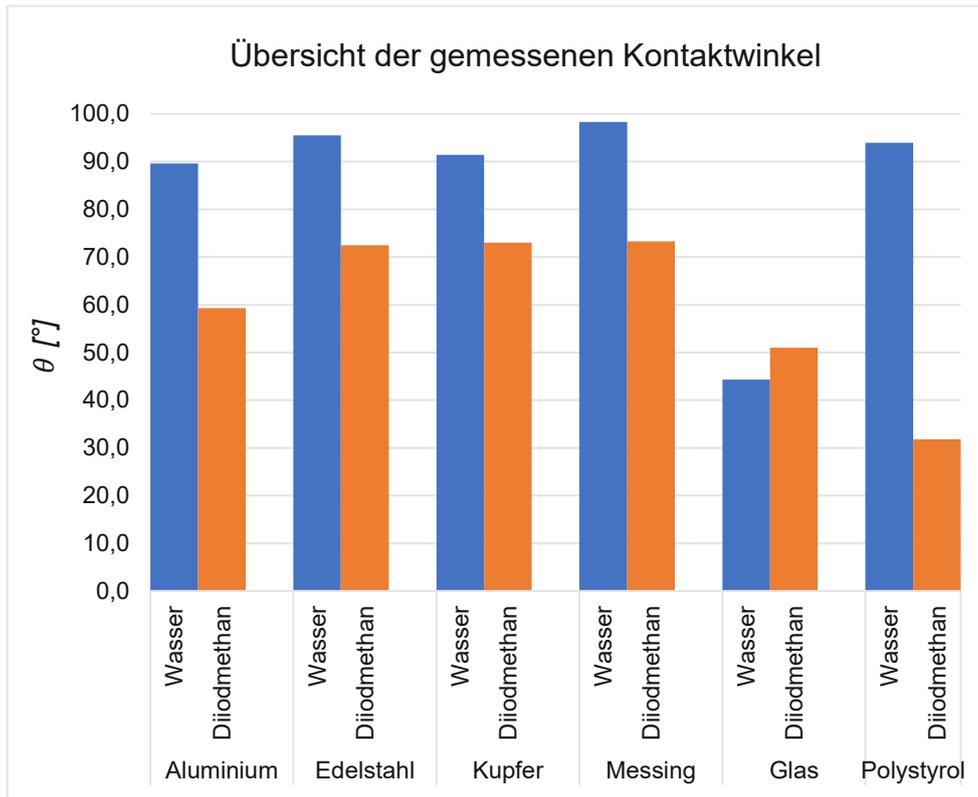


Abbildung 51: Mittelwerte der Kontaktwinkel zwischen den verschiedenen Materialoberflächen und einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen

Für die folgenden Berechnungen wurden die ermittelten Mittelwerte der gemessenen Kontaktwinkel herangezogen. Mit den Gleichungen 10 und 11 des OWRK-Modells ist es nun möglich die dispersiven und polaren Oberflächenenergieanteile der einzelnen Materialoberflächen zu ermitteln (siehe Tabelle 4).

Tabelle 4: Ermittelte Oberflächenenergieanteile und gesamte Oberflächenenergie von verschiedenen Materialoberflächen

Oberflächenmaterial	σ_{SG}^D in J/m^2	σ_{SG}^P in J/m^2	$\sigma_{SG} = \sigma_{SG}^D + \sigma_{SG}^P$ in J/m^2
Aluminium	0,02898	0,00260	0,03158
Edelstahl	0,02149	0,00249	0,02398
Kupfer	0,02121	0,00385	0,02506
Messing	0,02105	0,00185	0,02290
Glas	0,03371	0,02449	0,05820
Polystyrol	0,04346	0,00019	0,04365

Abbildung 52 stellt die ermittelten Oberflächenenergien der verschiedenen Festkörpermateriale grafisch dar. Es ist anzumerken, dass Podgornik et al. [62] und Aspenes et al. [63] ähnliche Oberflächenenergiewerte in dieser Größenordnung für eine Edelstahloberfläche (0,03 bzw. 0,064 J/m^2) feststellen konnten. Auch die Ergebnisse für eine Aluminium- (0,059 J/m^2), Messing- (0,045 J/m^2) und Glasoberfläche (0,065 J/m^2) befinden sich in dieser Dimension [62].

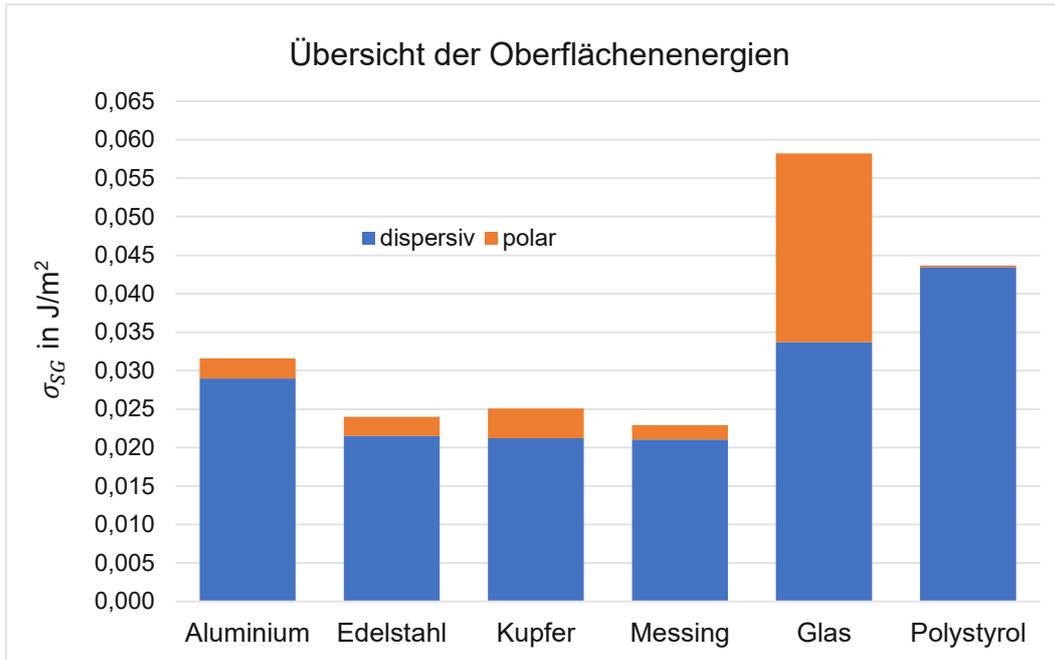


Abbildung 52: Ermittelte Oberflächenenergieanteile der verschiedenen Festkörperoberflächen

Da der dispersive Oberflächenenergieanteil bei allen Materialoberflächen (außer Glas) stark überwiegt, können sich mehr Wechselwirkungen mit dem rein dispersiven Diiodmethan ausbilden als mit Wasser, wodurch eine bessere Benetzung möglich ist und daher ein geringerer Kontaktwinkel die Folge ist. Wasser weist hingegen einen höheren polaren als dispersiven Oberflächenenergieanteil auf, sodass sich weniger Wechselwirkungen zwischen den beiden Phasen ausbilden können. Dies hat ein schlechteres Benetzungsvermögen und dadurch einen größeren Kontaktwinkel zur Folge.

Es ist zu erkennen, dass der dispersive Anteil der Oberflächenenergie von Polystyrol am höchsten ist und damit ca. doppelt so groß ist, wie die niedrigsten dispersiven Oberflächenenergien (Edelstahl, Kupfer und Messing). Dazwischen ordnen sich die Werte von Aluminium und Glas ein. Bezüglich der polaren Anteile der Oberflächenenergie ist zu sagen, dass hier größere Unterschiede als bei den dispersiven Anteilen auftreten. Den geringsten Wert weist die Polystyroloberfläche auf. Die Anteile von Messing, Edelstahl, Aluminium und Kupfer sind um den Faktor 10-20 höher. Den höchsten Wert für die polare Oberflächenenergie besitzt die Glasoberfläche, welcher ca. 130-mal höher ist als jener der Polystyroloberfläche.

Vergleicht man die gesamten Oberflächenenergien der einzelnen Materialien, ist zu erkennen, dass die nichtmetallischen Oberflächen einen doppelt bis dreifach höheren Wert als die metallischen Oberflächen aufweisen. Obwohl Polystyrol eine fast doppelt so hohe gesamte Oberflächenenergie wie Edelstahl oder Messing aufweist, schließen alle drei Oberflächen sehr ähnliche Kontaktwinkel mit einem Wassertropfen ein. Dies ist unter anderem auf den Einfluss des höheren polaren Oberflächenenergieanteils der metallischen Materialien zurückzuführen.

Die berechneten Grenzflächenenergien σ_{SL} nach dem Ansatz von OWRK (Gleichung 13) und nach der Young'schen Theorie (Gleichung 1) sind für die ausgewählten Festkörpermateriale mit einem Wassertropfen in Tabelle 5 aufgelistet.

Tabelle 5: Ermittelte Grenzflächenenergien von verschiedenen Festkörperoberflächen mit einem Wassertropfen

Oberflächenmaterial	σ_{SL} in J/m^2 (OWRK)	σ_{SL} in J/m^2 (Young)
Aluminium	0,03108	0,03107
Edelstahl	0,03095	0,03096
Kupfer	0,02683	0,02684
Messing	0,03343	0,03341
Glas	0,00610	0,00610
Polystyrol	0,04866	0,04873

Es ist zu sehen, dass die Werte der Grenzflächenenergien zwischen den metallischen Festkörperoberflächen und Wasser ähnlich groß sind. Im Vergleich dazu ist die Grenzflächenenergie der Polystyroloberfläche mit einem Wassertropfen um das 1,5-fache höher und jene der Glasoberfläche nur ca. ein Fünftel so groß. Weiters stimmen die Ergebnisse der beiden Theorien beinahe exakt überein. Die geringfügige Abweichung ist auf Rundungsfehler in den Berechnungen zurückzuführen. Abbildung 53 stellt die ermittelten Grenzflächenenergien der verschiedenen Festkörpermateriale grafisch dar.

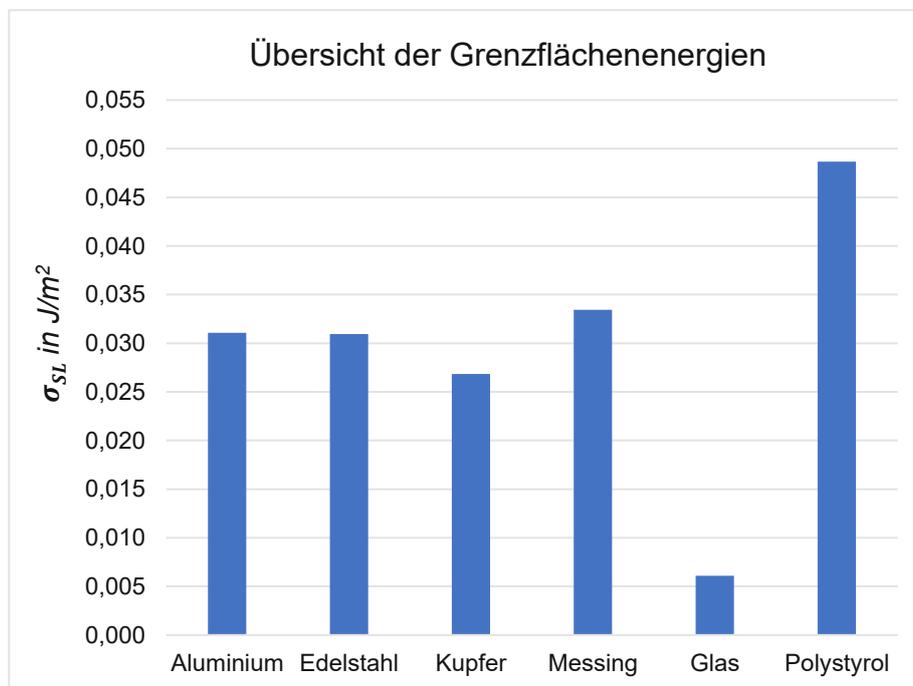


Abbildung 53: Ermittelte Grenzflächenenergien der verschiedenen Festkörperoberflächen

7.2. Simulationen

7.2.1. Case-Setup

Abbildung 54 zeigt zunächst die gesamte Geometrie des Cases, wobei jene Zellen, denen Luft zugeordnet wurde, rot gefärbt sind und jene, die das Festkörpermaterial darstellen, blau erscheinen. Der Flüssigkeitstropfen befindet sich im Zentrum der Domäne und ist daher in dieser Ansicht nicht ersichtlich.

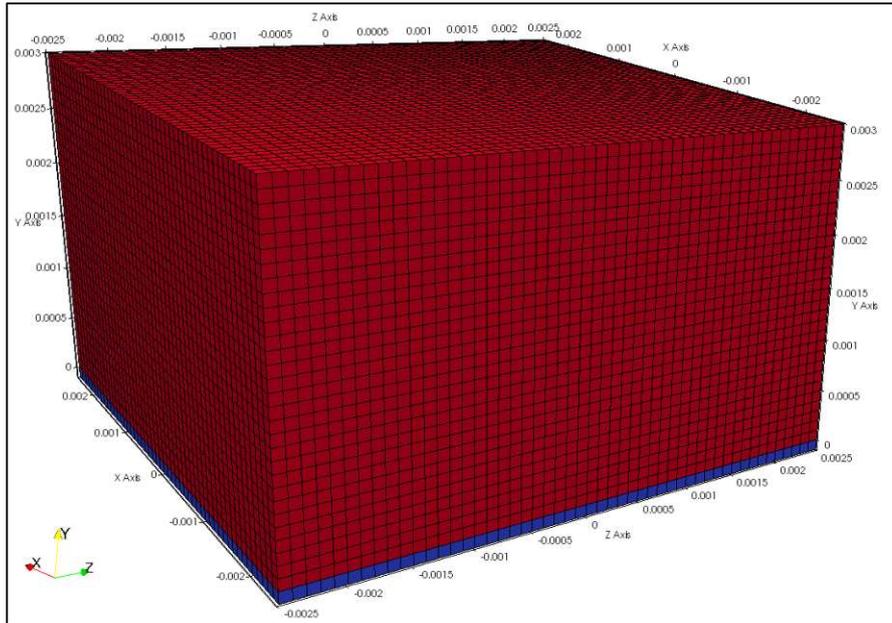


Abbildung 54: Gesamte Geometrie des Cases eines fallenden Flüssigkeitstropfen auf eine ideal ebene Oberfläche (rote Zellen: Luft; blaue Zellen: Festkörpermaterial); Abmessungen in Meter

Die Domäne besitzt eine quadratische Grundfläche mit einer Seitenlänge von 5 mm und einer Höhe von 3 mm. Die Fallbeschleunigung ($g = 9,81 \text{ m/s}^2$) zeigt normal auf die Festkörperoberfläche in die negative y-Richtung. Im Ausgangszustand besitzt die gesamte Geometrie ca. 129000 Zellen und die Zellenseitenlänge im Ausgangsnetz (Level 0) beträgt 0,1 mm. Der Anfangszustand einer derartigen Simulation ist in Abbildung 55 zu sehen. Diese Ansicht wird durch einen mittigen Schnitt der Geometrie in y-z-Ebene erreicht.

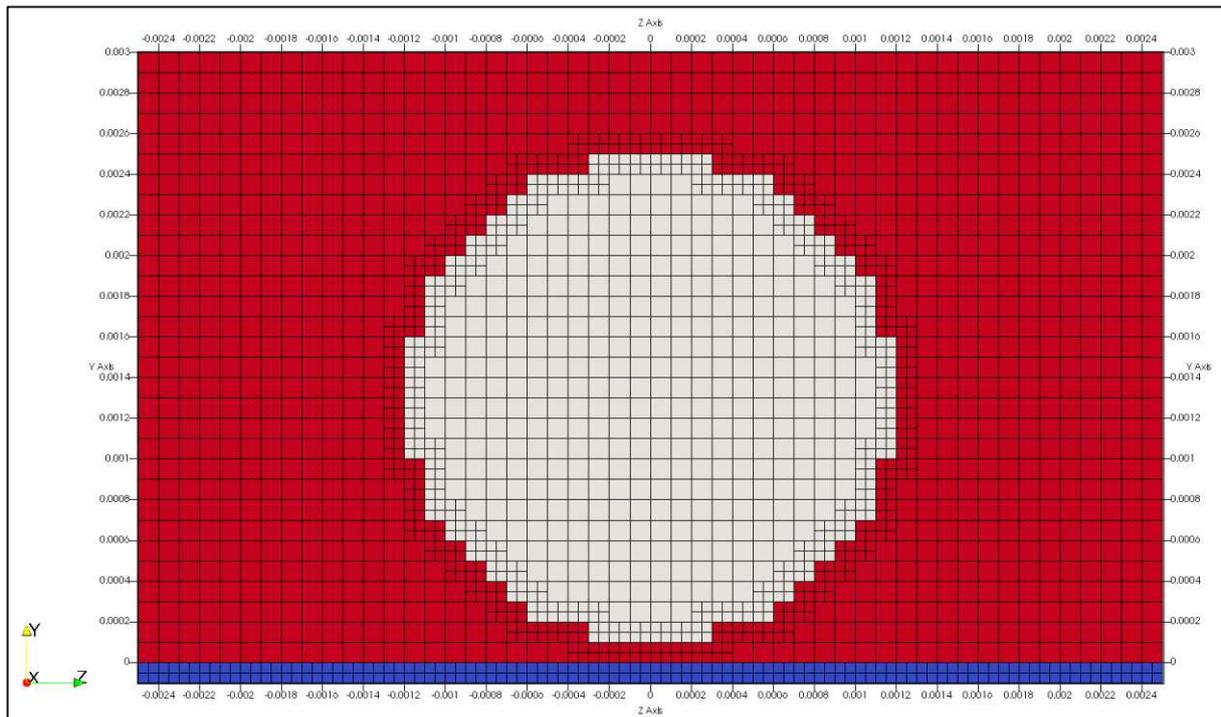


Abbildung 55: Ausgangszustand der Simulationen

Der Tropfen (grau), mit einem Radius von 1,2 mm und einem Volumen von ca. 7,24 mm³, wird aus geringer Höhe - der Abstand zwischen Tropfenunterseite und Festkörperoberfläche beträgt 0,1 mm - und ohne Anfangsgeschwindigkeit fallen gelassen. Bis der Tropfen auf der Oberfläche aufkommt und sich ein annähernd stationärer Zustand eingestellt hat, vergehen ca. 0,15 Sekunden. An der Grenze der Flüssigkeitsphase ist ein dynamisches Netz implementiert worden, welches sich mit dem Tropfen mitbewegt und dafür zuständig ist, dass die Tropfenkontur zu jedem Zeitpunkt um eine Stufe feiner vernetzt wird. Außerdem wurde an der Festkörperoberfläche eine statische Netzverfeinerung eingestellt.

Das Vernetzungswerkzeug snappyHexMesh wird in diesen Simulationen nicht verwendet. Somit finden die „snappyHexMeshDict“-Datei und das „triSurface“-Verzeichnis keine Anwendung. Die verschiedenen Cases unterscheiden sich ausschließlich in den zuvor errechneten Oberflächenenergieanteilen (siehe Tabelle 4) der verschiedenen Festkörperoberflächen, die der „AISI304“-Inputdatei übergeben werden. Die Oberflächenenergie der umgebenden Luft wurde mit dem Wert null festgelegt und die einzelnen Oberflächenenergieanteile des Wassers entsprechen jenen von Kapitel 3.3.1.

Im Anhang 14.1. sind Code-Auszüge folgender Dateien für diese Art von Simulation zu finden:

- blockMeshDict.block3D
- dynamicMeshDict.orig
- controlDict.orig
- setFields.orig
- AISI304.inp
- transportProperties

7.2.2. Simulationsergebnisse

In den Simulationen haben sich nach ca. 0,15 Sekunden annähernd stationäre Kontaktwinkel zwischen Wassertropfen und den Festkörperoberflächen eingestellt. Daher wurden die Simulationen zu diesem Zeitpunkt beendet. Die folgenden Abbildungen 56-61 zeigen die Benetzungszustände der verschiedenen Materialoberflächen mit einem Wassertropfen. Es ist zu sehen, dass mittig im liegenden Tropfen ein kleiner Luftschluss vorhanden ist.

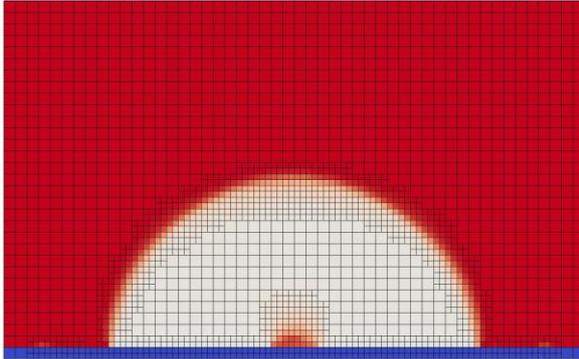


Abbildung 56: Simulationsergebnis Aluminiumoberfläche

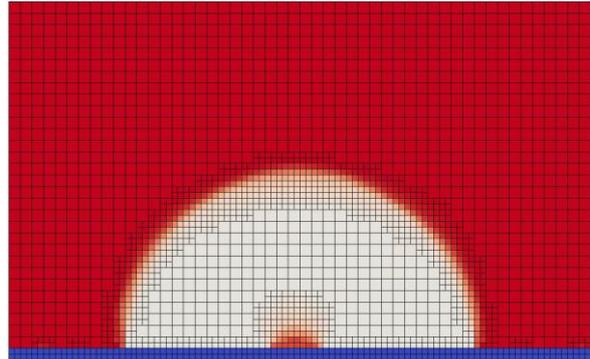


Abbildung 57: Simulationsergebnis Edelstahloberfläche

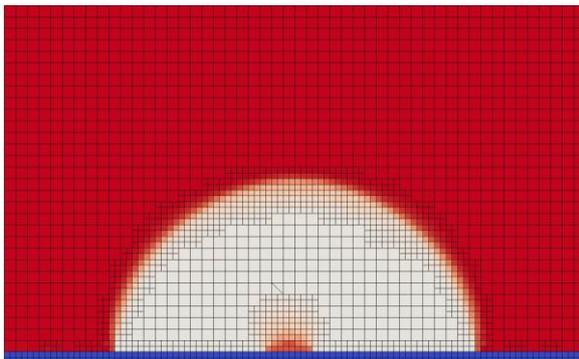


Abbildung 58: Simulationsergebnis Kupferoberfläche

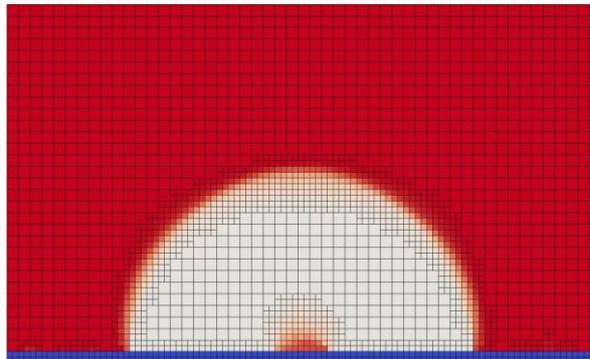


Abbildung 59: Simulationsergebnis Messingoberfläche

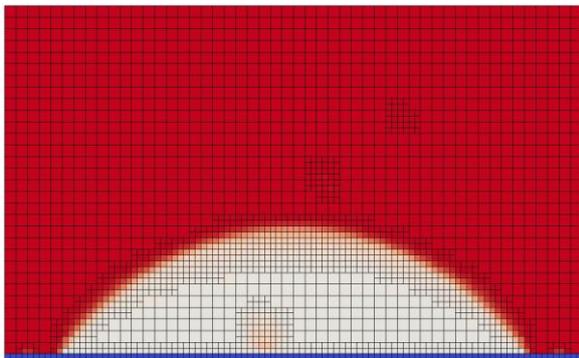


Abbildung 60: Simulationsergebnis Glasoberfläche

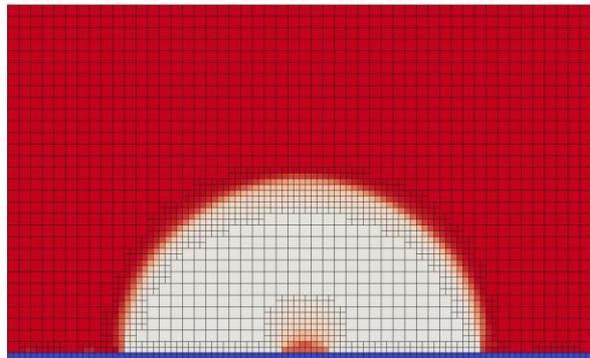


Abbildung 61: Simulationsergebnis Polystyroloberfläche

Für die Bestimmung des Kontaktwinkels der Simulationsergebnisse kommt, wie schon bei den experimentellen Versuchen, die Bildanalysesoftware SCA20 zum Einsatz. Die Voraussetzung für die Anwendung dieser Software auf ein externes Bild ist das Bild-Dateiformat Bitmap (24-Bit), ein Schwarz-Weiß-Kontrast und eine möglichst hohe Bildauflösung. Da die Ergebnisbilder der Simulationen keine entsprechend hohe Auflösung haben, muss zunächst eine Bearbeitung dieser durchgeführt werden. Bevor das Bild (z.B.: als JPEG-Datei) in ParaView abgespeichert wird, werden die Kanten der Vernetzung ausgeblendet, die Farblegende auf „X-Ray“ umgestellt und nur die Flüssigkeitsphase (schwarz) eingeblendet (siehe Abbildung 62a). Weiters wird das abgespeicherte Bild in das kostenlose Grafikprogramm „GIMP“ geladen. Mithilfe des Gaußschen Weichzeichners und einer Anpassung des Kontrastes, ist es möglich die Tropfenkontur hochauflösend darzustellen und einen Schwarz-Weiß-Kontrast zu generieren (siehe Abbildung 62b).

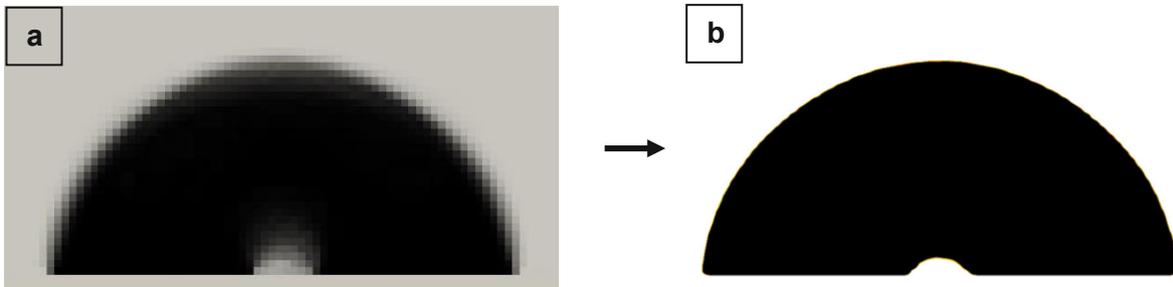


Abbildung 62: Darstellung der Flüssigkeitsphase eines Simulationsergebnisses mit der X-Ray Farbskala (a) und Tropfenkontur nach der Bearbeitung mit dem Grafikprogramm GIMP (b)

Aus nicht nachvollziehbaren Gründen ist eine Kontaktwinkelmessung mit der Bildanalysesoftware an der neuerlich in GIMP abgespeicherten Datei im 24-Bit-Bitmap Format, nicht möglich. Daher wurde diese Datei ein weiteres Mal in der Grafiksoftware Microsoft Paint im 24-Bit-Bitmap Dateiformat abgespeichert. Anschließend konnte eine Kontaktwinkel-messung durch das Festlegen der Basislinie durchgeführt werden. Zur Bestimmung der Kontaktwinkel wurde diesmal die „Tangent-Leaning“-Methode, anstatt einer Methode der polynomen Funktion, angewendet, da die Tropfenkontur damit besser abgebildet wurde.

7.3. Vergleich der Versuchs- und Simulationsergebnisse

In den folgenden Abbildungen 63-68 werden die Ergebnisse der sich einstellenden Benetzungszustände der experimentellen Versuche und der zugehörigen Simulationen verglichen. Es ist anzumerken, dass es sich bei den angegebenen experimentellen Kontaktwinkeln um die oben ermittelten Mittelwerte handelt. Aus diesem Grund ist es möglich, dass der angegebene Wert vom Schattenbild abweicht.

Wassertropfen auf einer Aluminiumoberfläche

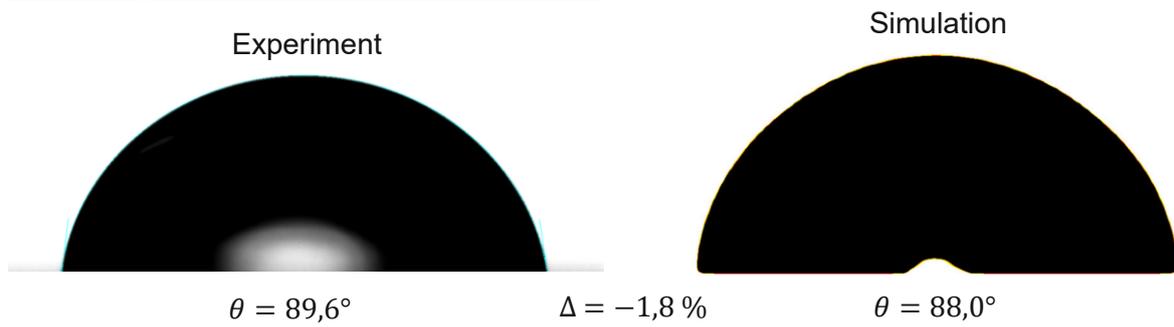


Abbildung 63: Benetzungszustand der Aluminiumoberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)

Wassertropfen auf einer Edelstahloberfläche

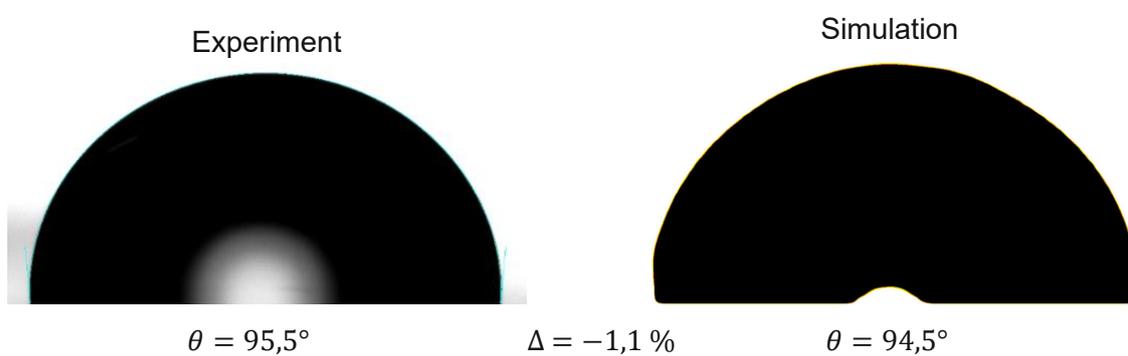


Abbildung 64: Benetzungszustand der Edelstahloberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)

Wassertropfen auf einer Kupferoberfläche

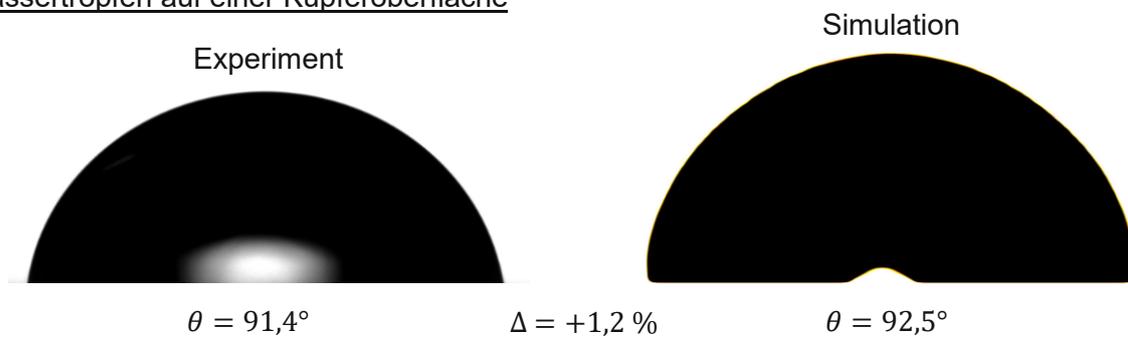


Abbildung 65: Benetzungszustand der Kupferoberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)

Wassertropfen auf einer Messingoberfläche

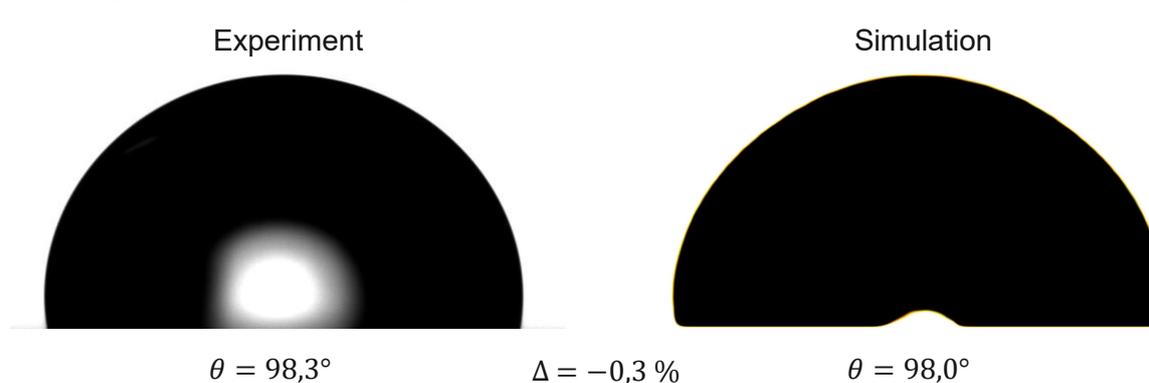


Abbildung 66: Benetzungszustand der Messingoberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)

Wassertropfen auf einer Glasoberfläche

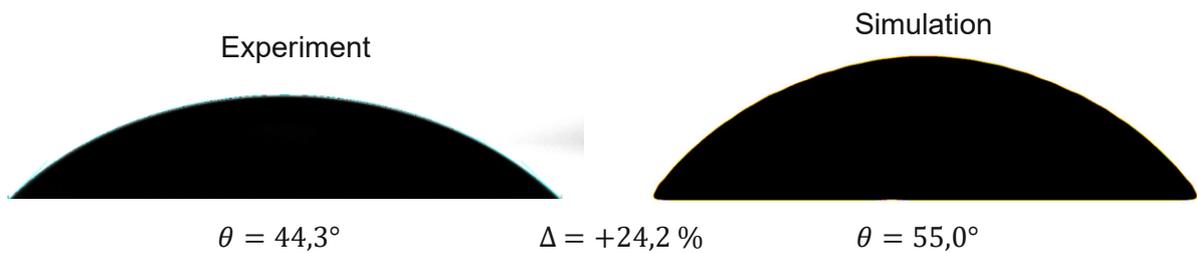


Abbildung 67: Benetzungszustand der Glasoberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)

Wassertropfen auf einer Polystyroloberfläche

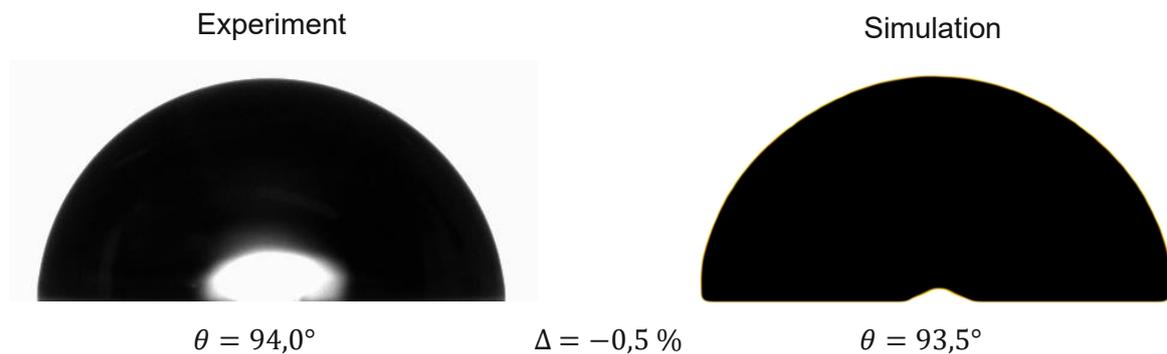


Abbildung 68: Benetzungszustand der Polystyroloberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)

Aus dem Vergleich der Simulationsergebnisse und der experimentellen Werte ist ersichtlich, dass der Betrag der Differenz in Bezug auf das experimentelle Ergebnis, bei Kontaktwinkeln von ca. 90° kleiner als 1,8 % ist. Die Kontaktwinkel zwischen einem Wassertropfen und der Glasoberfläche sind sowohl im Experiment als auch in der Simulation als hydrophil einzustufen, jedoch ist der Wert der Simulation um fast 25 % größer als jener des Versuchs. Es ist darauf hinzuweisen, dass eine Messungenauigkeit nicht außer Acht gelassen werden darf.

8. Simulation von Wenzel- und Cassie-Baxter-Zuständen

Vor der Simulation des Benetzungsverhaltens von komplexen laserstrukturierten Oberflächen wurde zunächst untersucht, wie sich der topografische Einfluss von regelmäßig strukturierten Oberflächen im Vergleich zu ideal ebenen Oberflächen in einer Simulation auswirkt. Hierbei wurden die Theorien nach Wenzel und Cassie-Baxter angewendet (siehe Kapitel 3.4.), in denen die mathematischen Zusammenhänge zwischen den Kontaktwinkeln nach Wenzel (θ_W) bzw. Cassie-Baxter (θ_{CB}) mit jenen nach Young (θ_Y) beschrieben werden (siehe Gleichungen 27 und 28) [40].

$$\cos(\theta_W) = r \cdot \cos(\theta_Y) \quad (\text{Gl. 27})$$

$$\cos(\theta_{CB}) = f \cdot \cos(\theta_Y) + f - 1 \quad (\text{Gl. 28})$$

In weiterer Folge wurden aus den Simulationsergebnissen die Kontaktwinkel zwischen einem Wassertropfen und einer ideal ebenen Oberfläche (Young) bzw. einer mikrostrukturierten Oberfläche (Wenzel, Cassie-Baxter) ermittelt und deren Zusammenhang mit den analytischen Werten aus den Gleichungen 27 und 28 verglichen. Dabei ist anzumerken, dass die Oberflächenenergiewerte beider Oberflächen ident sind.

8.1. Definition der Oberflächengeometrie

Als regelmäßige Oberflächenstruktur wurde eine Mikrosäulenordnung, bestehend aus quadratischen Prismen, gewählt (siehe Abbildungen 69). Es handelt sich um eine „offene“ Struktur, die das Entweichen von Luft bei der Benetzung mit einem Flüssigkeitstropfen erlaubt. Die Seitenlänge l der gesamten quadratischen Oberfläche beträgt 2,52 mm.

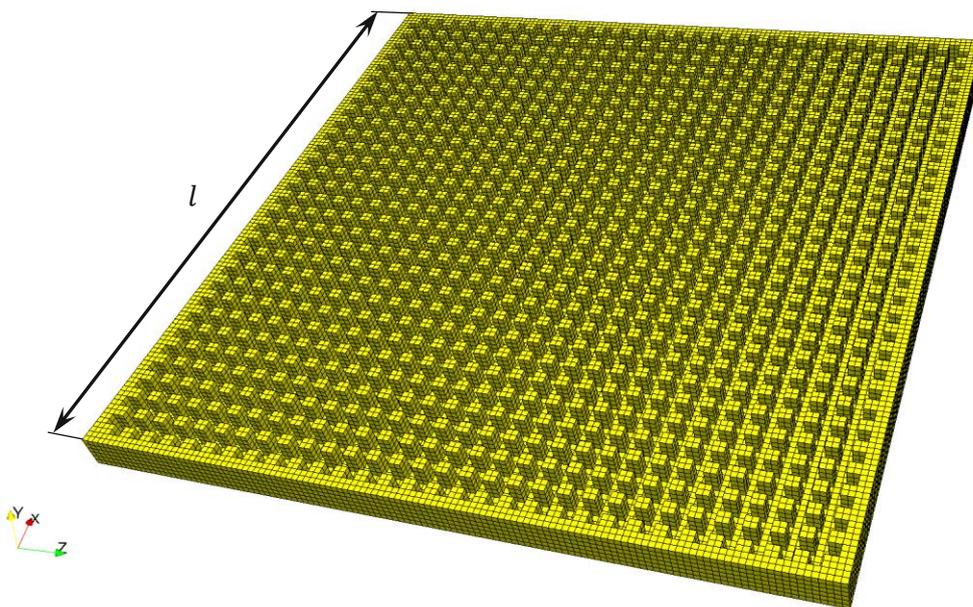


Abbildung 69: Darstellung der regelmäßig mikrostrukturierten Oberfläche in den Simulationen

Der Querschnitt der strukturierten Oberfläche in einem Schnitt parallel zur Y-Z-Ebene, ist in Abbildung 70 zu sehen.

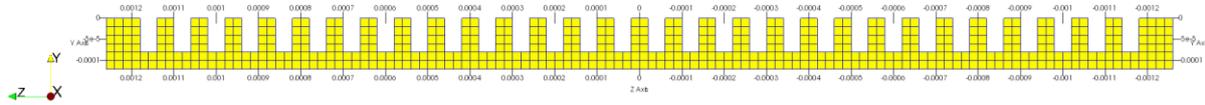


Abbildung 70: Querschnitt in Y-Z-Ebene der mikrostrukturierten Oberfläche

Abbildung 71 veranschaulicht die Abmessungen der gewählten Oberflächenstruktur, die für die analytischen Berechnungen relevant sind. Hierzu zählen die Säulenbreite w , die Säulenhöhe h und der Abstand a zwischen zwei benachbarten Säulen.

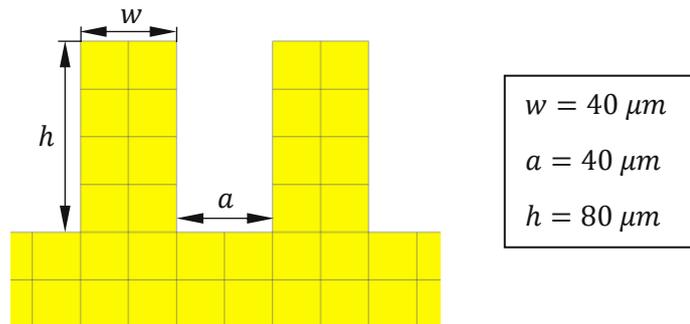


Abbildung 71: Abmessungen der Mikrosäulenstrukturierung

8.2. Analytische Berechnungen

Der Rauheitsfaktor r , der für die Berechnung des sich einstellenden Kontaktwinkels nach Wenzel (θ_W) benötigt wird und das Verhältnis zwischen der geometrischen und projizierten Oberfläche darstellt, wird für eine derartige Oberflächengeometrie mit folgender Gleichung ermittelt [39]:

$$r = 1 + \frac{4 \cdot w \cdot h}{(a + w)^2} \quad (\text{Gl. 29})$$

Somit ergibt sich für den Rauheitsfaktor ein Wert von $r = 3$. Der vom Flüssigkeitstropfen benetzte Festkörperoberflächenanteil f , der bei der Ermittlung des Kontaktwinkels nach Cassie-Baxter (θ_{CB}) einfließt, wird mit folgender Gleichung bestimmt [64]:

$$f = \frac{w^2}{(a + w)^2} \quad (\text{Gl. 30})$$

Setzt man die gegebenen Werte der Abmessungen ein, ergibt sich $f = 0,25$. Weiters kann der kritische Kontaktwinkel (θ_{crit}), der den Übergang zwischen einem Wenzel- und einem Cassie-Baxter-Zustand kennzeichnet, für diese Oberflächenstruktur analytisch mit folgender Gleichung bestimmt werden [65]:

$$\theta_{crit} = \arccos\left(\frac{f - 1}{r - f}\right) \quad (\text{Gl. 31})$$

Für diese Oberflächenstruktur ergibt sich als kritischer Kontaktwinkel $\theta_{crit} = 105,8^\circ$.

Im Zuge der durchgeführten Simulationen wurde der topografische Einfluss der Oberflächen-geometrie in Abhängigkeit der Oberflächenenergie des Festkörpers untersucht. Alle Festkörperoberflächen besitzen zur Vereinfachung ausschließlich einen dispersiven Anteil der Oberflächenenergie. Es wurden sieben verschiedene Simulationsfälle (Cases) erstellt, die sich in den Werten der Festkörperoberflächenenergie σ_{SG} unterschieden und daher verschiedene Benetzungszustände zur Folge hatten. Zur Festlegung der Festkörperoberflächenenergien wurde zunächst von ebenen Oberflächen ausgegangen und die zu untersuchenden Kontaktwinkel (θ_Y) definiert. Anschließend wurde mit der Young'schen Formel (siehe Gleichung 1) und dem Modell nach OWRK für die Berechnung der Grenzflächenenergie (siehe Gleichung 13) die Oberflächenenergie $\sigma_{SG} = \sigma_{SG}^D$ berechnet. Diese ist je Simulation sowohl für die ebene als auch die regelmäßig strukturierte Oberfläche gültig. Die Kontaktwinkel nach Wenzel (θ_W) und Cassie-Baxter (θ_{CB}) wurden mit den Gleichungen 27-30 ermittelt. Als Flüssigkeit wurde herkömmliches Wasser verwendet, welches sowohl einen polaren als auch einen dispersiven Oberflächenenergieanteil besitzt (siehe Kapitel 3.3.1.). Tabelle 6 veranschaulicht die analytischen Ergebnisse.

Tabelle 6: Übersicht der untersuchten Cases mit Young'schem Kontaktwinkel (θ_Y) als Ausgangspunkt. Die Oberflächenenergie der Festkörperoberfläche σ_{SG} wird je Case sowohl der ebenen als auch der strukturierten Oberfläche übergeben. Analytische Ergebnisse der sich einstellenden Kontaktwinkel nach der Wenzel (θ_W) & Cassie-Baxter (θ_{CB}) Theorie.

Simulationsbezeichnung	σ_{SG} in J/m^2	θ_Y [°]	θ_{CB} [°]	θ_W [°]
Case-80	0,0837	80	-	58,6 (-26,7 %)
Case-90	0,0608	90	-	90,0 (+0,0 %)
Case-100	0,0415	100	142,5 (+42,5 %)	121,4 (+21,4 %)
Case-110	0,0263	110	146,7 (+33,3 %)	-
Case-120	0,0152	120	151,1 (+25,9 %)	-
Case-135	0,0052	135	157,9 (+16,9 %)	-
Case-160	0,0002	160	170,0 (+6,3 %)	-

Abbildung 72 stellt die Abhängigkeit des Young'schen Kontaktwinkels (θ_Y) zwischen einem Wassertropfen und einer ideal ebenen, rein dispersiven Festkörperoberfläche als Funktion der Festkörperoberflächenenergie grafisch dar.

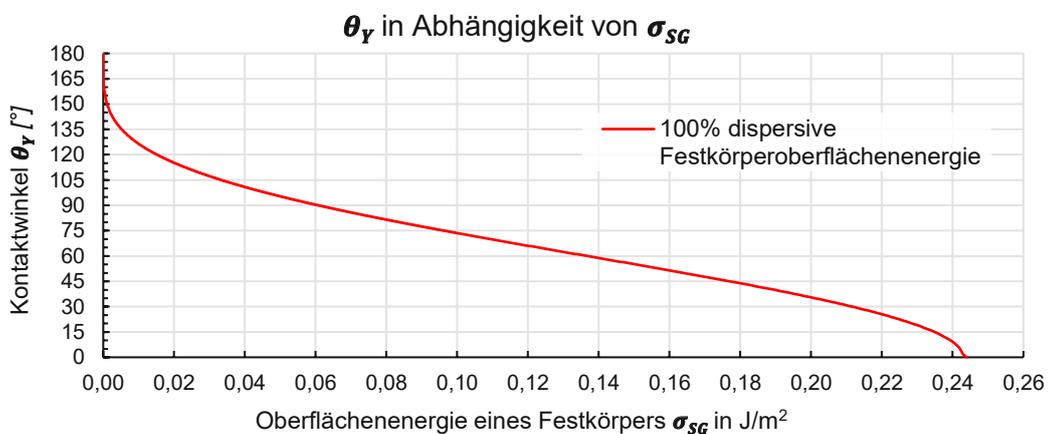


Abbildung 72: Kontaktwinkel eines Wassertropfen mit einer rein dispersiven Festkörperoberfläche in Abhängigkeit von der Festkörperoberflächenenergie

8.3. Case-Setup

Das Case-Setup dieser Simulationen entspricht grundsätzlich dem der ebenen Oberflächen aus Kapitel 7. Die regelmäßig strukturierte Oberfläche wurde in der Datei „setFieldsDict.orig“ festgelegt, indem mehrere Quader, die sich in der Festkörperphase befinden, mit der Phase der umgebenden Luft definiert wurden. Ein Auszug dieser Datei ist im Anhang (14.2) zu finden. Im Ausgangszustand besitzt eine derartige Simulation ungefähr 425000 Zellen, das Tropfenvolumen wurde mit 2,48 μl festgelegt. Im Bereich der Festkörperoberfläche ist eine stationäre und an der Grenze der Flüssigkeitsphase eine dynamische Verfeinerung des Netzes vorgegeben. Abbildung 73 zeigt den Ausgangszustand dieser Simulationen, wobei diese Ansicht durch einen mittigen Schnitt der Geometrie in der Y-Z-Ebene erzielt wurde. Hierbei ist der Wassertropfen grau, die Festkörperoberfläche blau und die umgebende Luft rot dargestellt.

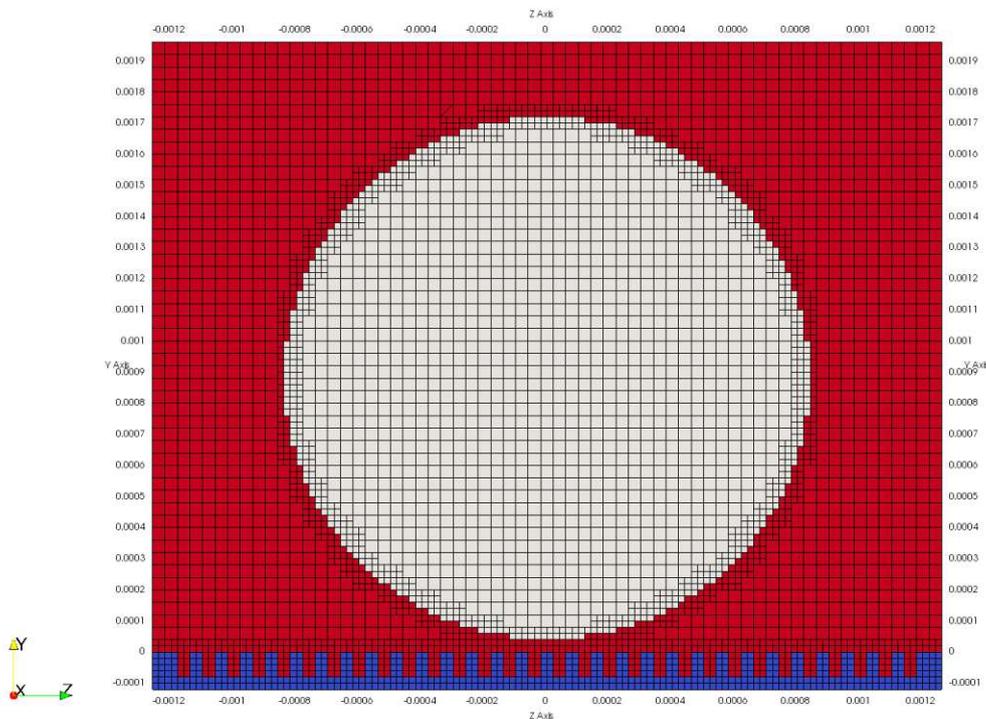


Abbildung 73: Ausgangszustand der Simulationen mit einer regelmäßig strukturierten Oberfläche

Da in den Simulationen, die einen Wenzel-Zustand als Ergebnis hatten, Probleme bei der Vernetzung der Bereiche zwischen den „Säulen“ der Festkörperoberfläche aufgetreten sind, wurden diese um eine Stufe feiner vernetzt. Um die dadurch gestiegene Zellenanzahl wieder zu verringern, wurden die Zellen der umgebenden Luft und des Wassertropfens vergrößert. Somit ergibt sich eine Zellenanzahl von ungefähr 500000 Zellen. In Abbildung 74 ist ein Ausschnitt einer derartig vernetzten Domäne dargestellt.

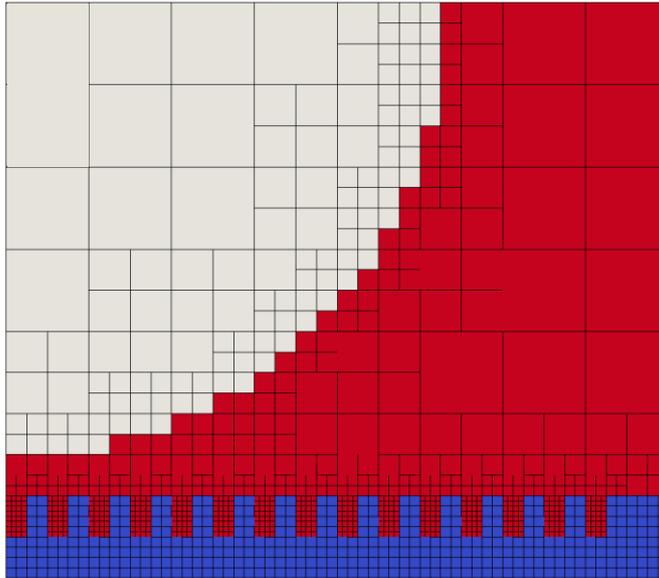


Abbildung 74: Anpassung der Vernetzung bei einem Wenzel-Benetzungsverhalten: feinere Vernetzung in den Zwischenräumen der Oberflächenstruktur

8.4. Simulationsergebnisse & Interpretation

Die folgenden Abbildungen 75-81 repräsentieren die Ergebnisse der Simulationen zu einem Zeitpunkt (ca. 0,04 Sekunden), bei dem sich ein stabiler Kontaktwinkel eingestellt hat. Neben der Darstellung der Simulationsergebnisse in ParaView samt Zellenanordnung, werden unterhalb Schwarz-Weiß-Kontrastbilder der Tropfenform abgebildet.

Case-80

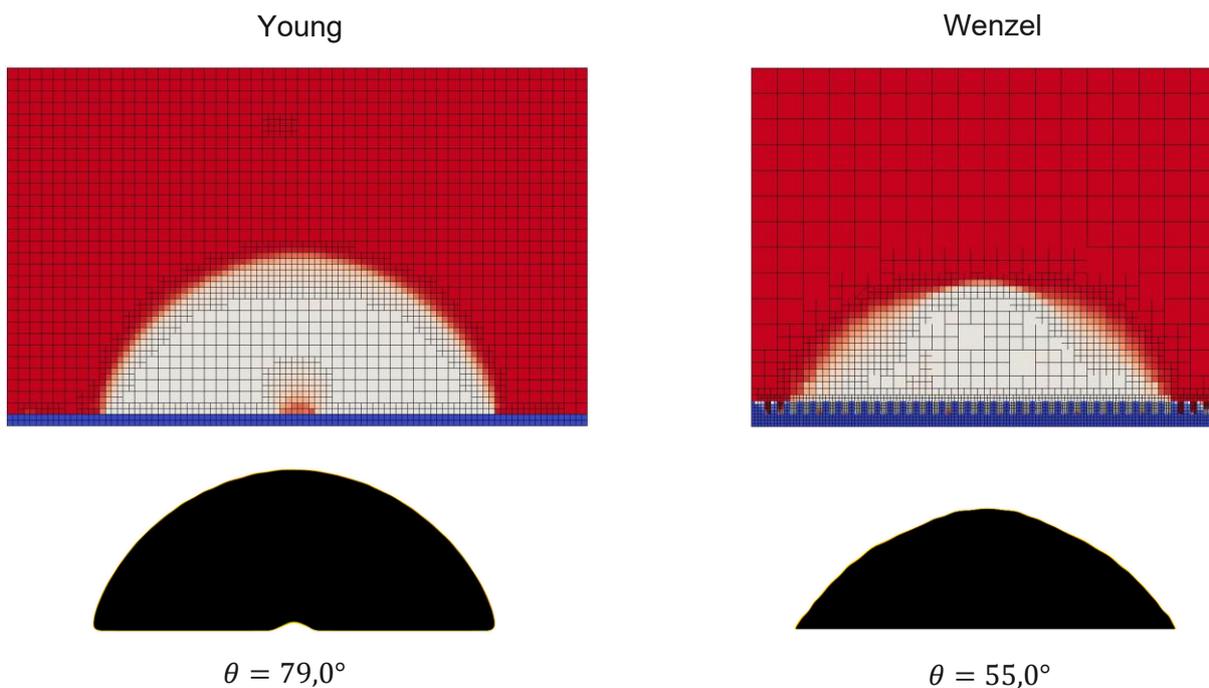
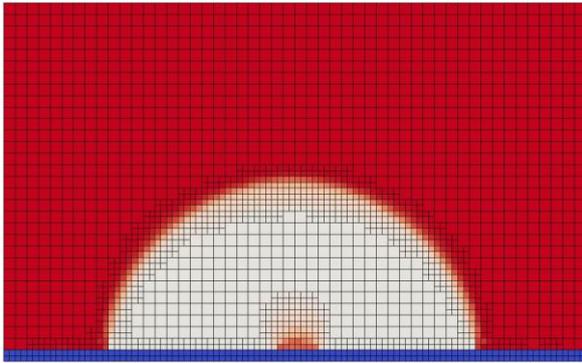


Abbildung 75: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-80: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)

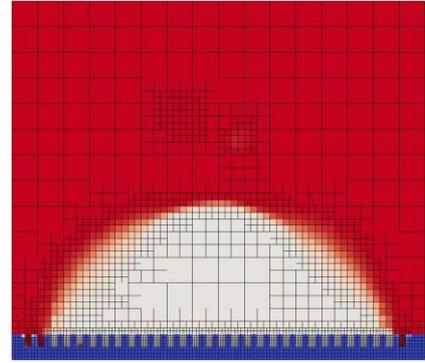
Case-90

Young



$$\theta = 88,6^\circ$$

Wenzel

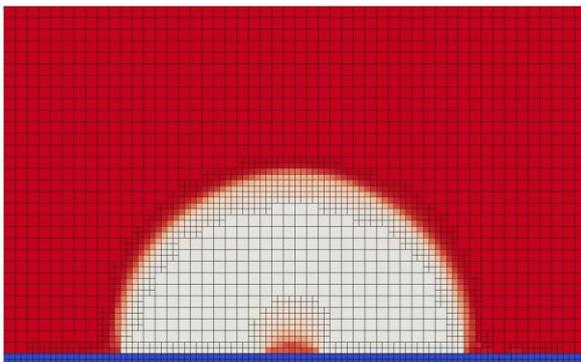


$$\theta = 71,5^\circ$$

Abbildung 76: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-90: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)

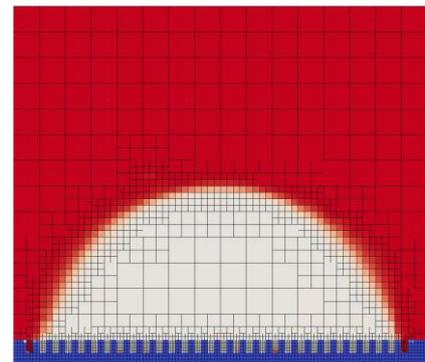
Case-100

Young



$$\theta = 98,0^\circ$$

Wenzel

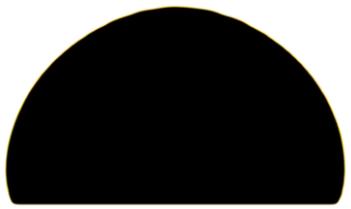
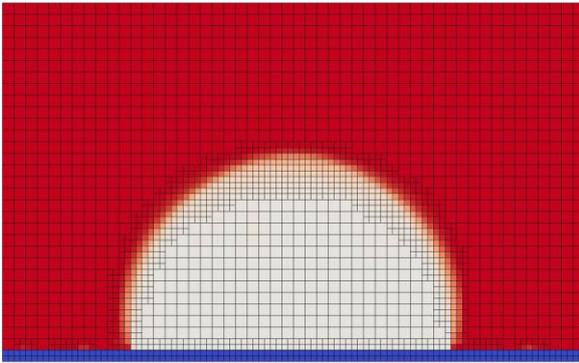


$$\theta = 73,0^\circ$$

Abbildung 77: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-100: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)

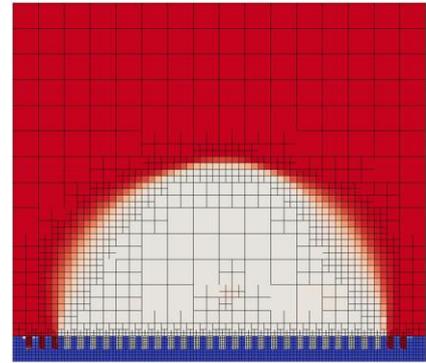
Case-110

Young



$$\theta = 111,0^\circ$$

Wenzel

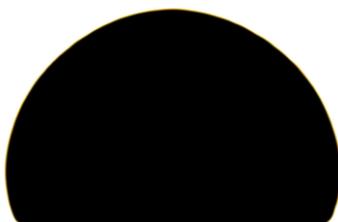
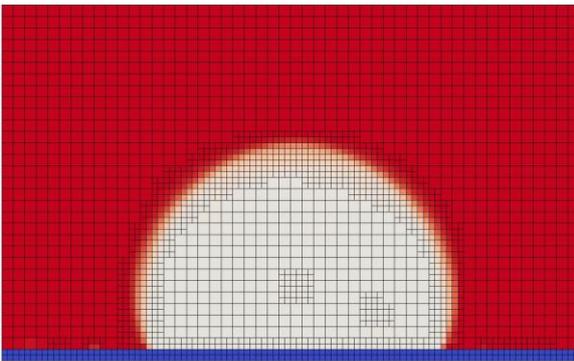


$$\theta = 91,0^\circ$$

Abbildung 78: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-110: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)

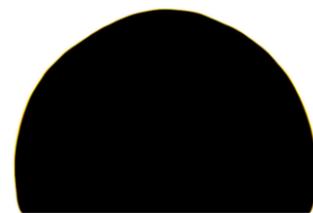
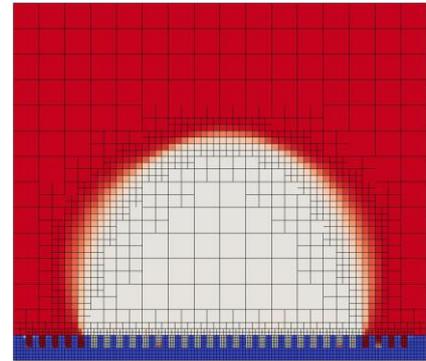
Case-120

Young



$$\theta = 118,0^\circ$$

Wenzel

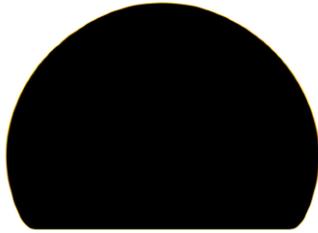
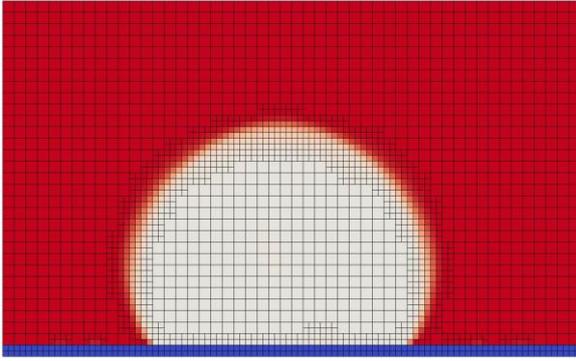


$$\theta = 108,0^\circ$$

Abbildung 79: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-120: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)

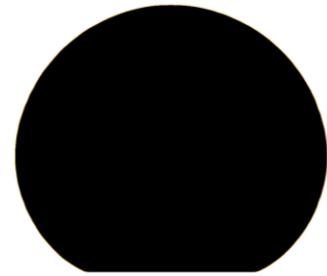
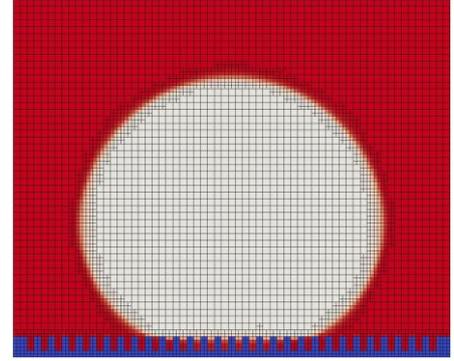
Case-135

Young



$$\theta = 129,0^\circ$$

Cassie-Baxter

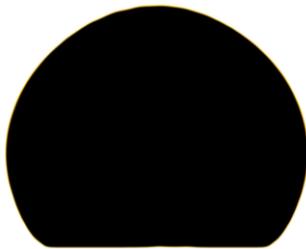
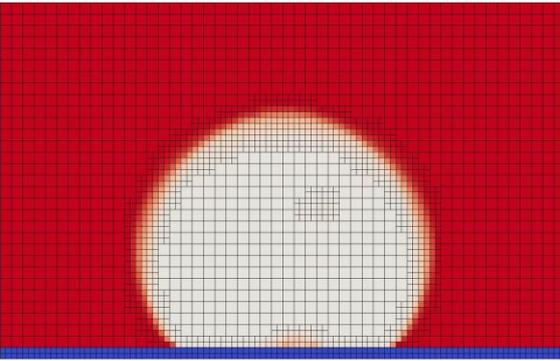


$$\theta = 152,0^\circ$$

Abbildung 80: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-135: Young-Zustand (links), Cassie-Baxter-Zustand (rechts)

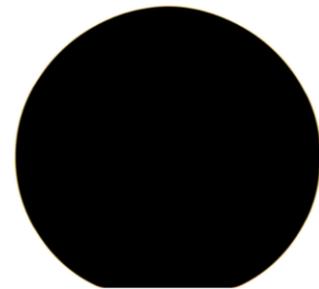
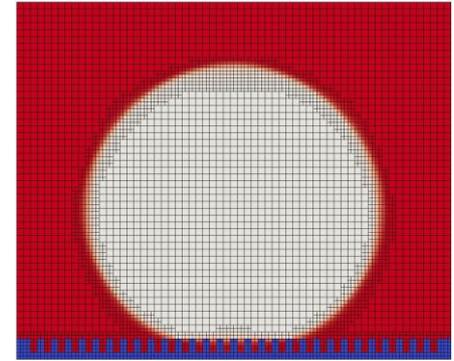
Case-160

Young



$$\theta = 141,5^\circ$$

Cassie-Baxter



$$\theta = 157,5^\circ$$

Abbildung 81: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-160: Young-Zustand (links), Cassie-Baxter-Zustand (rechts)

In Tabelle 7 sind die analytischen Ergebnisse und jene der Simulationen gesammelt gegenübergestellt.

Tabelle 7: Gegenüberstellung der analytischen Ergebnisse und der Simulationsergebnisse

Simulationsbezeichnung	θ_Y [°] (analytisch)	θ_Y [°] (Simulation)	Cassie-Baxter (CB) / Wenzel (W) -Zustand (analytisch)		θ_{CB} [°] (analytisch)	θ_{CB} [°] (Simulation)	Cassie-Baxter (CB) / Wenzel (W) -Zustand (Simulation)	
Case-80	80	79,0 (-1,3 %)	W	W	-	-	58,6	55,0 (-6,1 %)
Case-90	90	88,5 (-1,7 %)	W	W	-	-	90,0	71,5 (-20,6 %)
Case-100	100	98,0 (-2,0 %)	W	W	-	-	121,4	73,0 (-39,9 %)
Case-110	110	111,0 (+0,9 %)	CB	W	146,7	-	-	91,0
Case-120	120	118,0 (-1,7 %)	CB	W	151,1	-	-	108,0
Case-135	135	129,0 (-4,4 %)	CB	CB	157,9	152,0 (-3,7 %)	-	-
Case-160	160	141,5 (-11,6 %)	CB	CB	170,0	157,5 (-7,4 %)	-	-

Es ist zu erkennen, dass die Simulationsergebnisse der Young'schen Kontaktwinkel (θ_Y) zwischen 80° und 120° gut mit den analytischen Werten übereinstimmen und die absolute Abweichung für diese Cases maximal 2° entspricht. Die Differenz der Ergebnisse steigt jedoch bei Kontaktwinkeln, die größer als 120° sind an. So weisen die Ergebnisse von Case-135 eine Differenz von 6° und jene von Case-160 sogar 18,5° auf. Den Simulationsergebnissen zufolge befindet sich der Übergang zwischen den beiden eintretenden Zuständen (Wenzel & Cassie-Baxter) zwischen 120° und 135° und liegt somit über dem berechneten kritischen Kontaktwinkel von 105,8°. Die absoluten Abweichungen der Kontaktwinkel bei jenen Cases, bei denen ein Cassie-Baxter-Zustand nachgewiesen werden kann (Case-135 und Case-160), sind im Vergleich zu den Abweichungen der zugehörigen Young'schen Kontaktwinkel ähnlich groß. Da die Simulationsergebnisse von Case-110 und Case-120 anstatt eines analytisch vorhergesagten Cassie-Baxter-Zustandes, einen Wenzel-Zustand aufweisen, können diese

nicht mit den zugehörigen analytischen Werten verglichen werden. Abbildung 82 stellt die Kontaktwinkel nach Wenzel bzw. Cassie-Baxter in Abhängigkeit von jenem nach Young dar. Es werden hierbei die analytischen Ergebnisse und jene der Simulation grafisch dargestellt. Der kritische Kontaktwinkel (θ_{crit}) ist jener beim Übergang eines Wenzel-Zustandes in einen Cassie-Baxter Zustand.

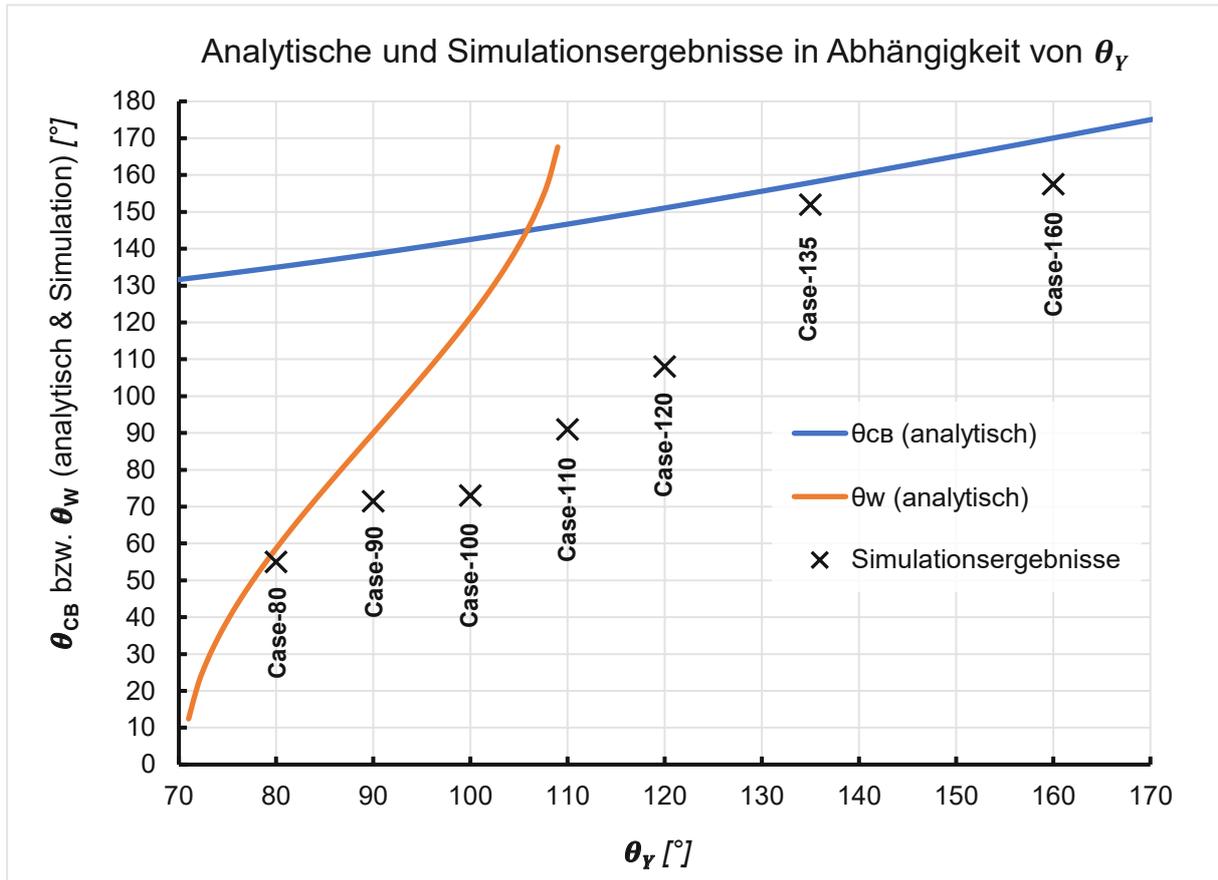


Abbildung 82: Gegenüberstellung der analytischen Ergebnisse und der Simulationsergebnisse: Kontaktwinkel nach Wenzel bzw. Cassie-Baxter in Abhängigkeit von jenem nach Young

Bei Simulationen, die einen Wenzel-Zustand als Ergebnis hatten, war eine größere Abweichung (bis zu 40 %) zu den analytischen Ergebnissen zu erkennen, als bei den Cassie-Baxter-Zuständen. Weiters sind die gemessenen Kontaktwinkel der Simulationen stets niedriger als jene der analytisch berechneten. Der Verlauf der Simulationsergebnisse und der analytischen Ergebnisse weist eine gewisse Ähnlichkeit auf, jedoch besteht eine Verschiebung der Simulationsergebnisse in positiver Richtung der Abszisse aufgrund eines höheren kritischen Kontaktwinkels.

9. Benetzung von laserstrukturierten Oberflächen

Dieses Kapitel widmet sich der Untersuchung des Benetzungsverhaltens von laserstrukturierten Oberflächen, welches sowohl durch eine chemische als auch eine topografische Veränderung beeinflusst wird. Ziel ist es, festzustellen, wie sich die beiden Einflüsse auf das Benetzungsverhalten der laserstrukturierten Oberflächen auswirken. Hierfür wurden Kontaktwinkelmessungen mit Wasser und Diiodmethan durchgeführt. Dabei wiesen die Oberflächen, abhängig von deren Behandlungszustand, verschiedene Oberflächenenergiewerte auf. Der Ablauf der experimentellen Kontaktwinkelmessungen ist ident zu jenem der ideal ebenen Oberflächen. Es wurde eine Probe aus Edelstahl mit vier unterschiedlich laserstrukturierten Feldern herangezogen (siehe Abbildung 83).

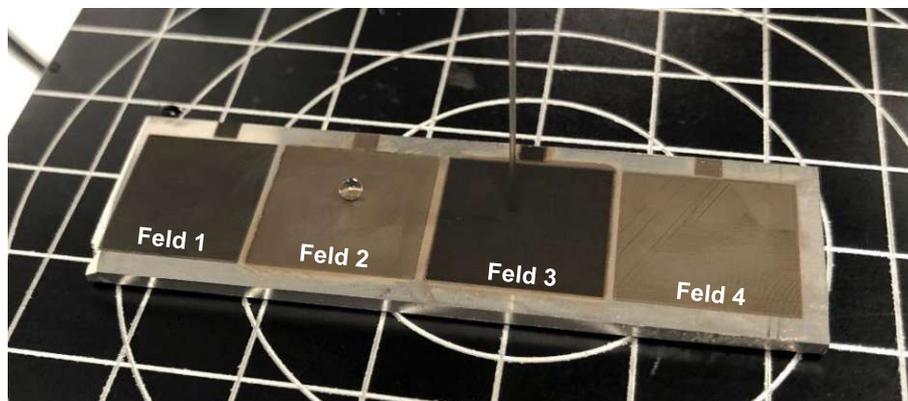


Abbildung 83: Edelstahlprobe mit unterschiedlich laserstrukturierten Feldern

9.1. Strukturierung der Oberflächen

Für eine digitalisierte Darstellung der laserstrukturierten Oberflächen, wurde das optische 3D Oberflächenmessgerät Alicona Infinite Focus G5 verwendet. In jedem Feld wurde ein kleiner quadratischer Ausschnitt ($450\mu\text{m} \times 450\mu\text{m}$ bei Feld 1,2 und 4 bzw. $900\mu\text{m} \times 900\mu\text{m}$ bei Feld 3) gescannt. Feld 1 besitzt eine sehr feine, laserinduzierte, periodische Oberflächenstruktur (LIPSS – Laser Induced Periodic Surface Structures) im Nanometerbereich. Aufgrund der eingeschränkten Auflösung des optischen Messgerätes, konnte diese Oberflächenstruktur nicht ausreichend abgebildet werden. Das ist auch der Grund dafür, dass diese Oberfläche in der folgenden Abbildung 84 sehr eben wirkt und die Strukturierung nur sehr schwach zu erkennen ist.

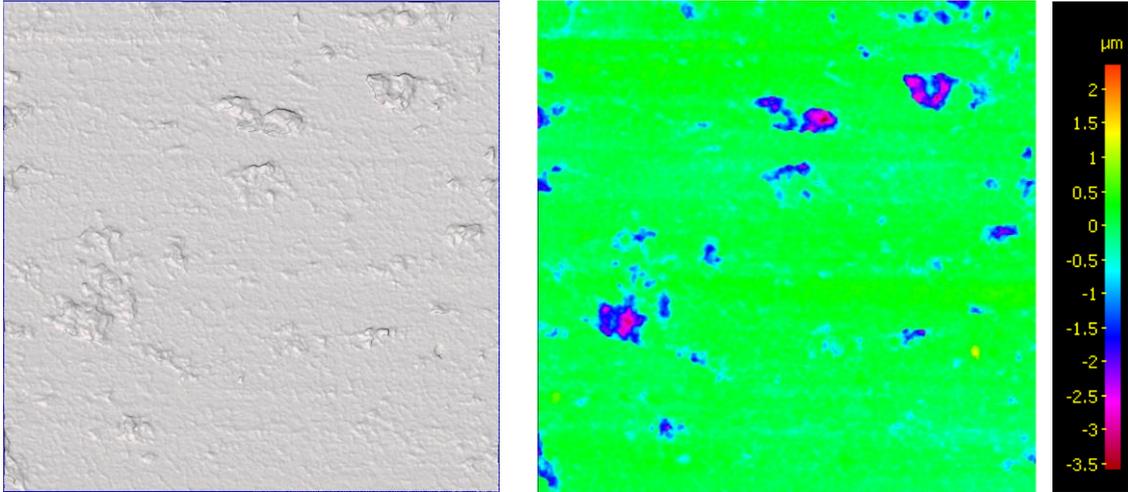


Abbildung 84: Gescannte laserstrukturierte Oberfläche (LIPSS) von Feld 1: Darstellung der Textur mit dem Programm Meshmixer (links), Darstellung der Höhenunterschiede (rechts)

Die Oberfläche von Feld 2 wurde derart bearbeitet, dass sich ein gitterartiges Muster ergab. Die Oberflächentextur dieses Feldes ist in Abbildung 85 zu sehen.

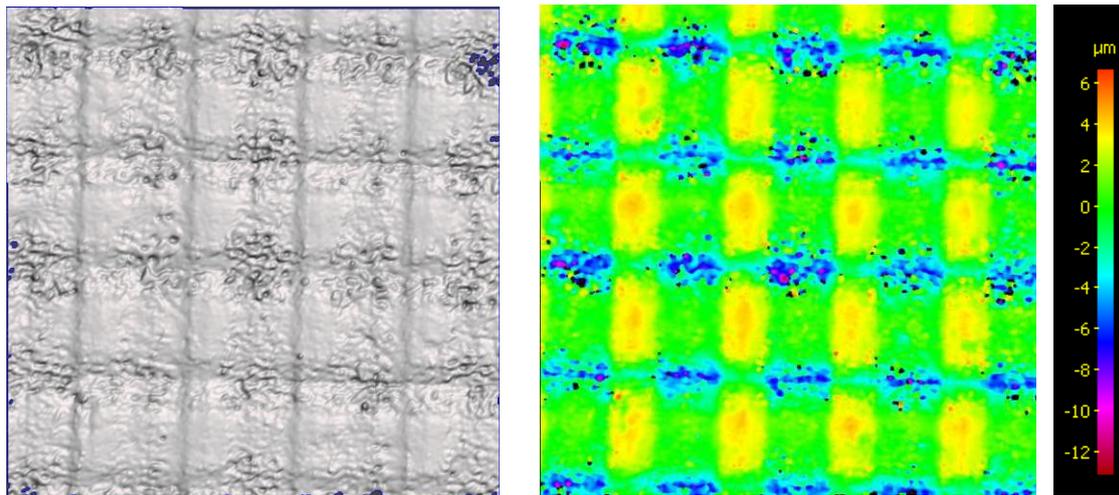


Abbildung 85: Gescannte laserstrukturierte Oberfläche (Gittermuster) von Feld 2: Darstellung der Textur mit dem Programm Meshmixer (links), Darstellung der Höhenunterschiede (rechts)

Bei näherer Betrachtung der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 3 sind aufgrund der gewählten Bearbeitungsstrategie sehr viele Vertiefungen zu sehen. Die Höhenunterschiede dieser Oberfläche sind deutlich größer als jene der Oberflächen der Felder 1 und 2. Dies bereitete dem optischen Oberflächenmessgerät Schwierigkeiten bei der Belichtung und infolgedessen konnte die Struktur nicht vollständig erfasst werden. Die auftretenden Fehlstellen (Löcher) der digitalen Oberfläche mussten mit dem Programm Meshmixer nachbearbeitet werden. Die Oberflächentextur dieses Feldes ist in Abbildung 86 zu sehen.

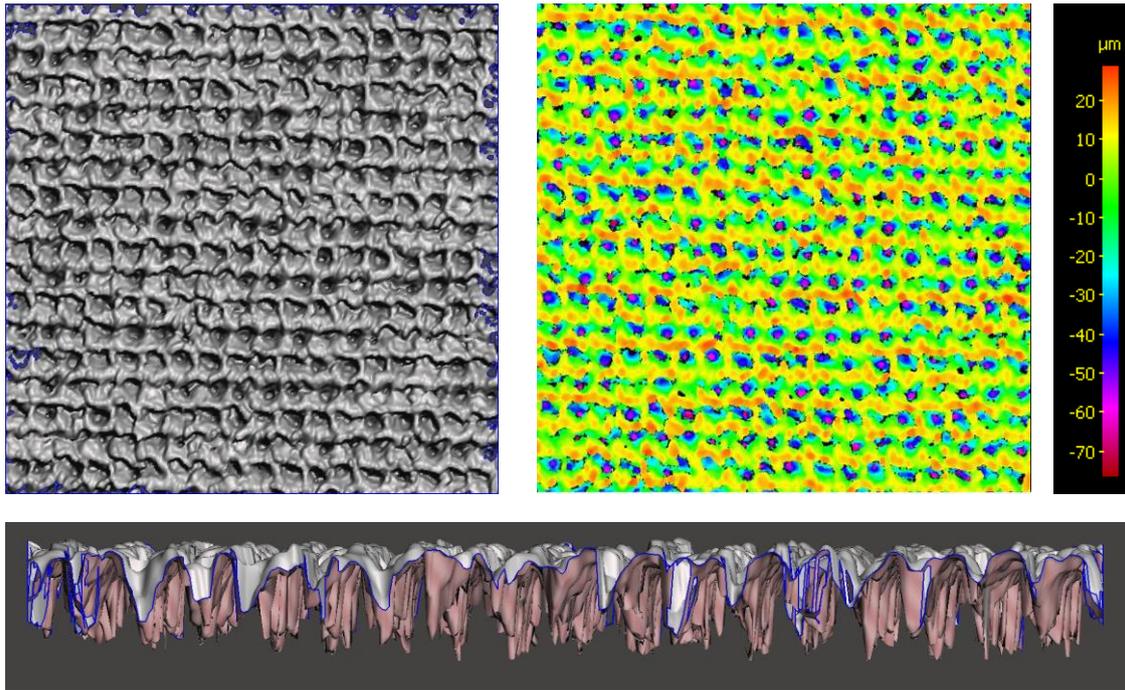


Abbildung 86: Gescannte laserstrukturierte Oberfläche (Vertiefungen) von Feld 3: Darstellung der Textur mit dem Programm Meshmixer (oben links und unten), Darstellung der Höhenunterschiede (oben rechts)

Die Oberfläche von Feld 4 weist eine rautenförmige Periodizität auf, wodurch sich pyramidenähnliche Erhebungen ergeben (siehe Abbildung 87).

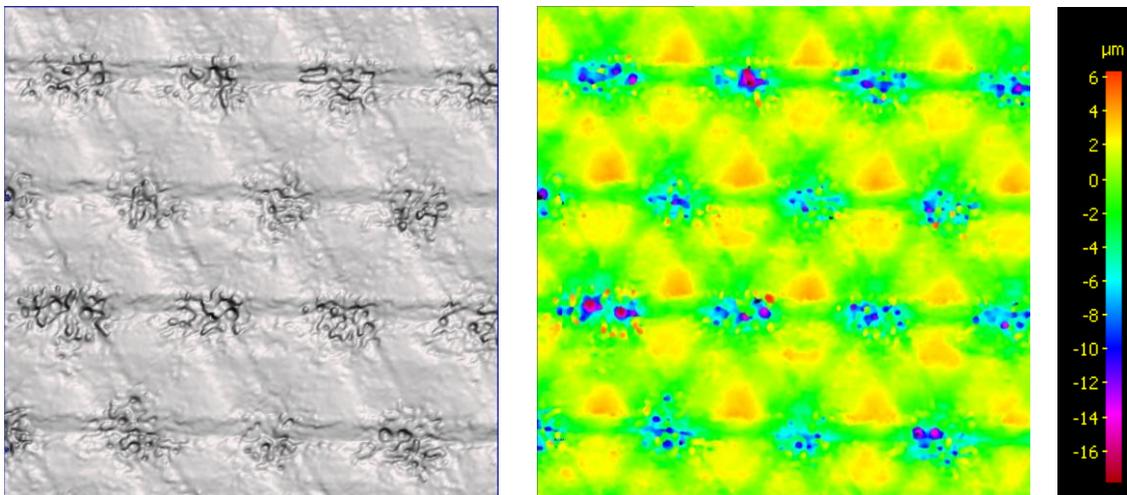


Abbildung 87: Gescannte laserstrukturierte Oberfläche (Rautengitter) von Feld 4: Darstellung der Textur mit dem Programm Meshmixer (links), Darstellung der Höhenunterschiede (rechts)

Da den Rauheitsparametern für das Benetzungsverhalten der einzelnen laserstrukturierten Oberflächen eine große Bedeutung zukommt, wurden diese bei allen Feldern mit dem optischen 3D Oberflächenmessgerät bestimmt. Die relevanten Parameter für die vorliegende Arbeit sind in Tabelle 8 aufgelistet.

Tabelle 8: Auswahl von Rauheitsparameterwerten der einzelnen laserstrukturierten Felder

Parameter	Einheit	Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4
S_a	μm	0,20	1,94	14,37	1,83
S_z	μm	5,90	19,77	105,50	23,64
S_{dr}	%	1,20	47,26	1329,94	83,96
S_{dq}	-	0,17	1,22	6,19	1,60

Hierbei steht S_a die mittlere arithmetische Höhe [66]. Der Höhenparameter S_z gibt die Summe aus dem Höhenwert der höchsten Erhebung und dem Höhenwert der stärksten Vertiefung an [67]. Bei S_{dr} handelt es sich, bezogen auf einen ideal ebenen Definitionsbereich, um den Prozentsatz der zusätzlichen Fläche, die auf die Strukturierung der Oberfläche zurückzuführen ist [68]. Dieser Parameter kann bei der Ermittlung des Rauheitsfaktors r (siehe Gleichung 19) für die Wenzel-Gleichung herangezogen werden. Der Parameter S_{dq} ermittelt sich in einem definierten Bereich als quadratischer Mittelwert der Steigungen an allen Punkten [69].

9.2. Experimentelle Versuche

Die experimentellen Kontaktwinkelmessungen wurden zu drei verschiedenen Zeitpunkten durchgeführt, wobei die laserstrukturierten Oberflächen zu jedem Zeitpunkt verschiedene Oberflächenbehandlungszustände aufwiesen. Zunächst wurden Kontaktwinkelmessungen unmittelbar nach der Herstellung der Oberflächenstrukturen durchgeführt. Weiters wurden Messungen, nach der Lagerung der Probe in einer Vakuumkammer gemacht. Nachdem die Probe und eine ebene Edelstahlplatte, mit Hilfe des Verfahrens der physikalischen Gasphasenabscheidung, mit einer dünnen Schicht aus Platin überzogen wurden, wurden ein weiteres Mal Kontaktwinkelmessungen durchgeführt.

9.2.1. Messungen unmittelbar nach der Herstellung

Laserstrukturierte Edelstahloberflächen weisen nach ihrer Herstellung mittels Ultrakurz-pulslaser zunächst ein stark hydrophiles Verhalten auf. Es wird angenommen, dass dieser Effekt auf einer chemischen Reaktion beruht, die durch die einwirkende Laserenergie ausgelöst wird. Die Laserenergie bewirkt eine Oxidation der obersten Oberflächenschicht [70]. Die Abbildungen 88-91 zeigen die Schattenbilder der Wassertropfen auf den einzelnen laserstrukturierten Oberflächen.



Abbildung 88: Wassertropfen auf Feld 1 – Messung 4

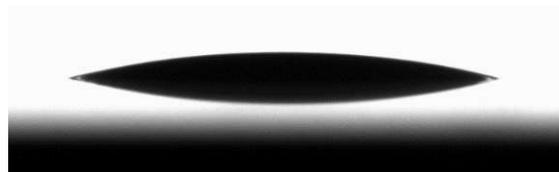


Abbildung 89: Wassertropfen auf Feld 2 – Messung 5

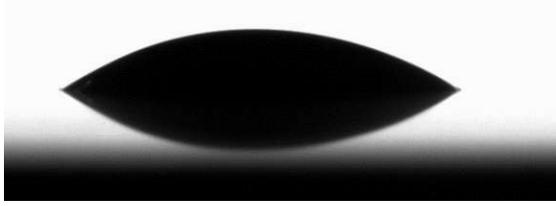


Abbildung 90: Wassertropfen auf Feld 3 – Messung 3

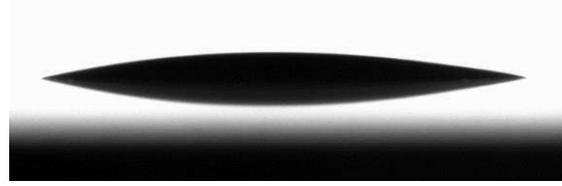


Abbildung 91: Wassertropfen auf Feld 4 – Messung 3

In Tabelle 9 sind die Messergebnisse, die berechneten arithmetischen Mittelwerte (\bar{x}) und mittleren absoluten Abweichungen vom arithmetischen Mittelwert ($d_{\bar{x}}$) zusammengefasst. Als Tropfenvolumen wurde $1 \mu\text{l}$ gewählt, da die Tropfenkonturen eines größeren Tropfens für Kontaktwinkelmessungen ungeeignet waren.

Tabelle 9: Gemessene Kontaktwinkel mit einem Wassertropfen unmittelbar nach der Herstellung

Kontaktwinkel mit Wasser (θ_{H_2O}) [°]				
Messung	Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4
1	8,5	19,0	34,5	10,5
2	10,5	16,0	36,5	9,0
3	9,0	10,5	33,0	10,0
4	11,0	13,5	31,5	8,0
5	13,0	13,5	31,5	15,5
$\bar{x} \pm d_{\bar{x}}$	10,4 ± 1,3	14,5 ± 2,4	33,4 ± 1,7	10,6 ± 2,0

Des Weiteren wurden Kontaktwinkelmessungen zwischen den Probenfeldern 1-4 und einem rein dispersiven Diiodmethantropfen durchgeführt (siehe Abbildungen 92-95).

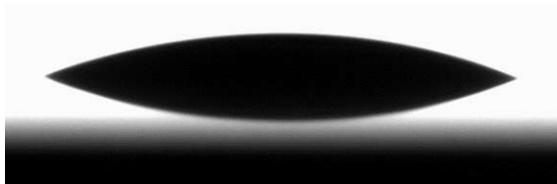


Abbildung 92: Diiodmethantropfen auf Feld 1 – Messung 3



Abbildung 93: Diiodmethantropfen auf Feld 2 – Messung 5



Abbildung 94: Diiodmethantropfen auf Feld 3 – Messung 2

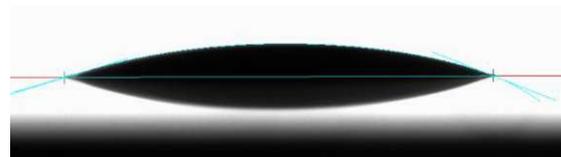


Abbildung 95: Diiodmethantropfen auf Feld 4 – Messung 4

Die gemessenen Werte, sowie statistische Berechnungen zur Ermittlung des arithmetischen Mittelwerts und der mittleren Abweichung sind in Tabelle 10 zusammengefasst.

Tabelle 10: Gemessene Kontaktwinkel mit einem Diiodmethantropfen unmittelbar nach der Herstellung

Kontaktwinkel mit Diiodmethan ($\theta_{CH_2I_2}$) [°]				
Messung	Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4
1	15,5	9,0	5,5	7,5
2	13,0	17,0	5,0	13,0
3	22,0	15,5	12,0	12,0
4	16,5	14,0	17,0	19,5
5	24,0	20,0	12,0	22,5
6	29,5	17,5	7,5	15,5
$\bar{x} \pm d_{\bar{x}}$	20,1 ± 5,1	15,5 ± 2,7	9,8 ± 3,8	15,0 ± 4,2

Es ist zu sehen, dass das Benetzungsverhalten der unmittelbar laserstrukturierten Oberflächen, sowohl mit einem Wassertropfen als auch mit einem Diiodmethantropfen sehr hydrophil ist. Auffallend ist, dass die Oberfläche von Feld 3, im Vergleich zu den anderen Oberflächen, mit Wasser den größten Kontaktwinkel und mit Diiodmethan den niedrigsten einschließt. In Abbildung 96 sind die gemessenen Kontaktwinkel der verschiedenen laserstrukturierten Oberflächen, unmittelbar nach ihrer Herstellung, mit einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen grafisch dargestellt.

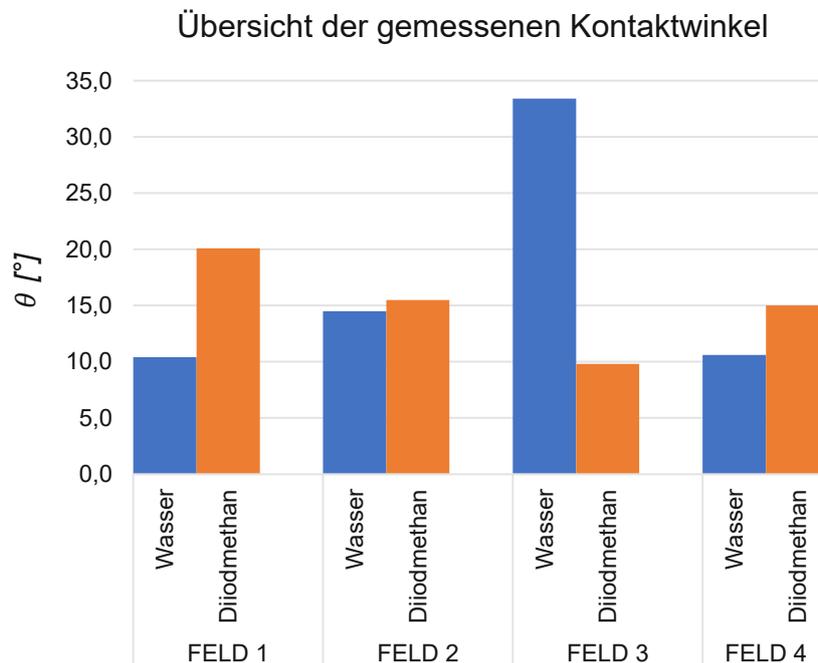


Abbildung 96: Übersicht der gemessenen Kontaktwinkel der laserstrukturierten Felder mit einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen (unmittelbar nach Herstellung der Oberflächen)

9.2.2. Messungen nach Lagerung in einer Vakuumkammer

Nach der Herstellung der laserstrukturierten Oberflächen werden im Laufe der Zeit organische Kohlenwasserstoffe aus der Umgebungsluft adsorbiert und dies bewirkt eine Änderung des Benetzungsverhalten von hydrophil zu hydrophob [70]. Ein hydrophobes Verhalten wird ohne zusätzlicher Behandlung jedoch erst nach mehreren Tagen bzw. Wochen erreicht. Um die Dauer der „Umwandlung“ von hydrophil zu hydrophob auf wenige Stunden zu reduzieren, wurde die Probe in einer Vakuumkammer gelagert. Die Abwesenheit einer Atmosphäre und somit auch Wasserdampf, führte zu einer erhöhten Adsorption von Kohlenwasserstoffen an der Oberfläche.

Die folgende Tabelle 11 fasst die gemessenen Kontaktwinkel der laserstrukturierten Probenfelder 1-4, die zuvor in einer Vakuumkammer gelagert wurden, mit einem Wassertropfen zusammen.

Tabelle 11: Gemessene Kontaktwinkel laserstrukturierter Oberflächenfelder (nach Lagerung in einer Vakuumkammer) mit einem 10 μ l Wassertropfen

Kontaktwinkel mit Wasser (θ_{H_2O}) [°]				
Messung	Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4
1	128,5	148,0	159,5	149,0
2	139,0	148,5	163,0	148,0
3	139,5	142,5	162,0	147,0
$\bar{x} \pm d_{\bar{x}}$	135,7 \pm 4,8	146,3 \pm 2,6	161,5 \pm 1,3	148,0 \pm 0,7

Wie zu erwarten, wiesen alle Oberflächen ein hydrophobes bzw. superhydrophobes Benetzungsverhalten auf (siehe Abbildungen 97-100).

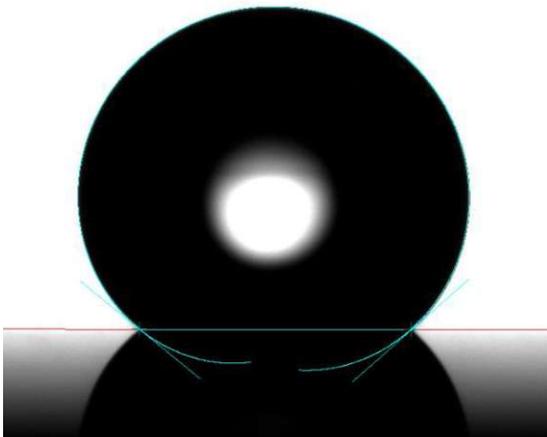


Abbildung 97: Wassertropfen auf Feld 1 – Messung 3

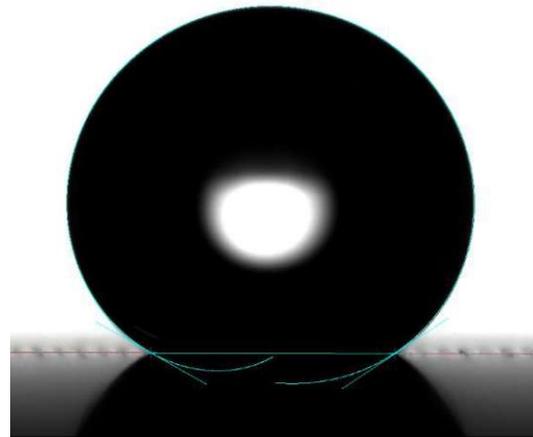


Abbildung 98: Wassertropfen auf Feld 2 – Messung 2

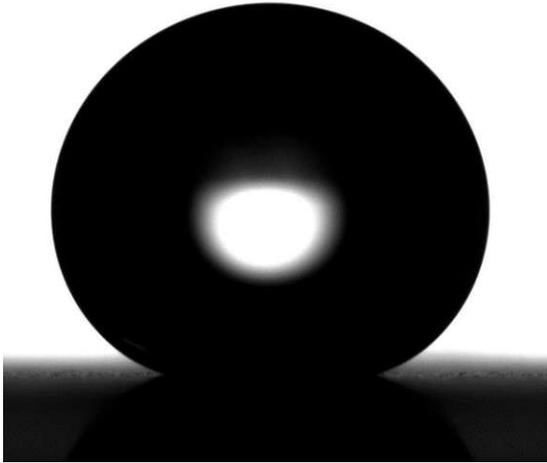


Abbildung 99: Wassertropfen auf Feld 3 – Messung 2

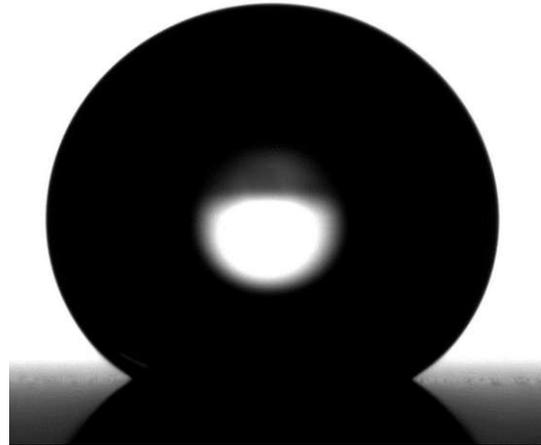


Abbildung 100: Wassertropfen auf Feld 4 – Messung 2

Es ist zu erkennen, dass die Oberfläche von Feld 3 den größten Kontaktwinkel ($161,5^\circ$) mit einem Wassertropfen einschließt und ein superhydrophobes Benetzungsverhalten aufweist. Die Kontaktwinkel der Felder 2 und 4 sind um ca. 9 % geringer als jene von Feld 3. Die Oberfläche von Feld 1 weist den geringsten Kontaktwinkel ($135,7^\circ$) auf, jedoch darf auch diese eindeutig als hydrophob bezeichnet werden.

Weiters wurden die Kontaktwinkel der Probenfelder 1-4 mit einem rein dispersiven Diiodmethantropfen gemessen (siehe Tabelle 12 und Abbildungen 101-103).

Tabelle 12: Gemessene Kontaktwinkel laserstrukturierter Oberflächenfelder (nach Lagerung in einer Vakuumkammer) mit einem $5\ \mu\text{l}$ Diiodmethantropfen

Kontaktwinkel mit Diiodmethan ($\theta_{\text{CH}_2\text{I}_2}$) [$^\circ$]				
Messung	Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4
1	21,5	8,0	0,0	11,5
2	34,0	19,0	0,0	19,5
3	41,5	29,5	0,0	13,5
4	53,5	31,5	0,0	18,5
5	49,5	30,5	0,0	18,0
6	45,0	33,5	0,0	16,0
$\bar{x} \pm d_{\bar{x}}$	$40,8 \pm 8,7$	$25,3 \pm 7,9$	$0,0 \pm 0,0$	$16,2 \pm 2,5$



Abbildung 101: Diiodmethantropfen auf Feld 1 – Messung 6



Abbildung 102: Diiodmethantropfen auf Feld 2 – Messung 6



Abbildung 103: Diiodmethantropfen auf Feld 4 – Messung 6

Bei der Oberfläche von Feld 3 ist eine vollständige Benetzung feststellbar und der Diiodmethantropfen „zerfließt“ unmittelbar nach dem ersten Kontakt (siehe Abbildung 104).

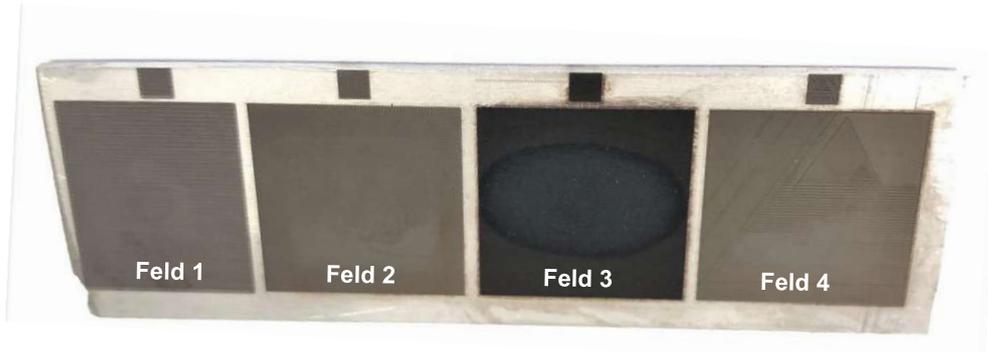


Abbildung 104: Volle Benetzbarkeit von Feld 3 mit Diiodmethantropfen

Das Benetzungsverhalten der Felder 1, 2 und 4 mit einem Diiodmethantropfen ist als hydrophil zu bewerten, wobei die Oberfläche von Feld 1 den größten Kontaktwinkel ($40,8^\circ$) aufweist. Abbildung 105 stellt die gemessenen Kontaktwinkel der verschiedenen vakuumgelagerten laserstrukturierten Oberflächen mit einem Wasser bzw. Diiodmethantropfen grafisch dar.

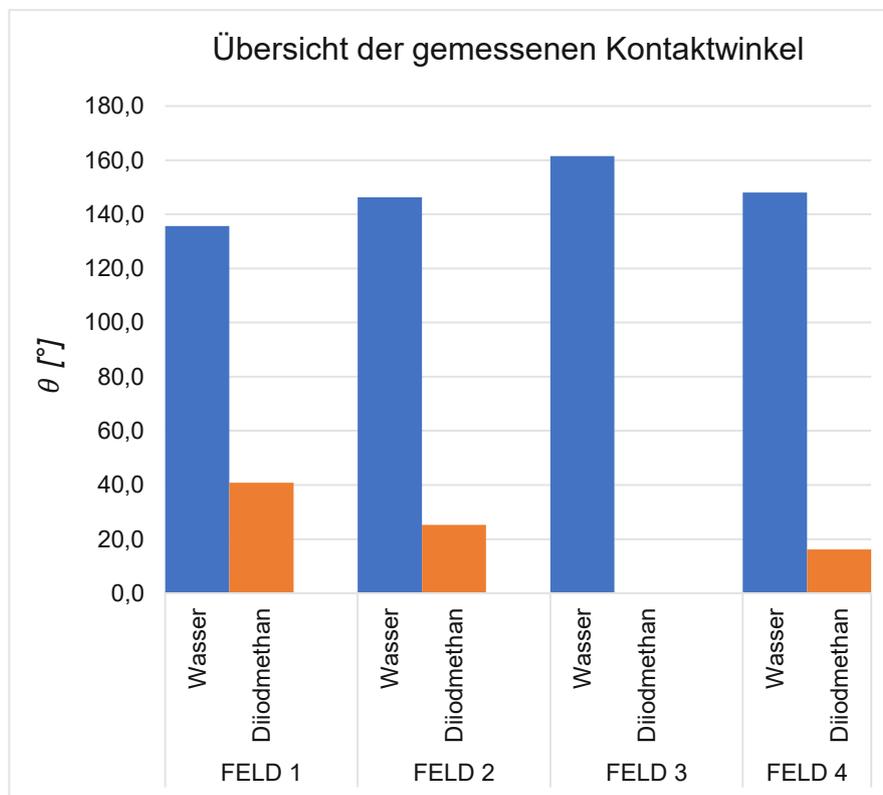


Abbildung 105: Übersicht der gemessenen Kontaktwinkel der laserstrukturierten Felder mit einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen (nach Lagerung der Oberflächen in einer Vakuumkammer)

9.2.1. Messungen nach der Beschichtung mit Platin

Um den Einfluss des chemischen Zustandes der laserstrukturierten Oberflächen auf die Messergebnisse, im Vergleich zu den Messwerten einer ebenen unbehandelten Oberfläche weitgehend zu verringern, wurde eine fünf Nanometer dünne Platinschicht sowohl auf eine ebene, nicht polierte Edelstahloberfläche als auch auf die laserstrukturierten Probenfelder aufgetragen. Als Probekörper wird jener mit dieselben laserstrukturierten Oberflächen (Feld 1-4) wie bei den Messungen zuvor herangezogen. Das Auftragen der Beschichtung wurde mithilfe einer Sputterdeposition, welche zu den Verfahren der physikalischen Gasphasenabscheidung (PVD – Physical Vapour Deposition) zählt, bewerkstelligt. Hierbei werden Atome aus einem Festkörper (Target), in diesem Fall Platin, durch Beschuss mit energiereichen Ionen herausgelöst. Diese Platinatome gehen in die Gasphase über, setzen sich auf den Oberflächen (Substrat) ab und bilden eine sehr dünne Schicht. Der Gasdruck in der Prozesskammer muss dabei so gering sein, dass die herausgelösten Festkörperatome das Substrat erreichen, ohne mit Gasteilchen zusammenzustoßen [71]. Für diesen Beschichtungsprozess kam der Magnetron-Sputterbeschichter Quorum Q150T S zum Einsatz. Anschließend wurden Kontaktwinkelmessungen mit einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen durchgeführt. Die folgende Tabelle 13 fasst die gemessenen Kontaktwinkel mit einem Wassertropfen auf den gesputterten Oberflächen im Vergleich zu einer ebenen Oberfläche vor dem Sputtern zusammen.

Tabelle 13: Gemessene Kontaktwinkel mit einem 10 µl Wassertropfen (Ebene Oberfläche vor und nach dem Sputtern bzw. laserstrukturierte Felder 1-4 nach dem Sputtern)

Kontaktwinkel mit Wasser (θ_{H_2O}) [°]						
Messung	ebene O. (vor Sputtern)	ebene O. (nach Sputtern)	Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4
1	74,5	92,0	129,0	145,5	158,5	143,5
2	74,5	100,0	137,0	141,5	157,0	143,5
3	74,0	92,0	134,5	147,5	151,5	132,0
4	70,0	88,5	136,5	149,0	156,0	148,5
5	74,0	94,5	130,5	148,5	157,0	141,0
6	73,5	92,0	129,0	138,0	151,0	135,5
$\bar{x} \pm d_{\bar{x}}$	73,4 ± 1,1	93,2 ± 2,7	132,8 ± 3,3	145,0 ± 3,5	155,2 ± 2,6	140,7 ± 4,6

Im Vergleich zu den gemessenen Kontaktwinkeln der laserstrukturierten Oberflächen nach der Lagerung in einer Vakuumkammer (siehe Tabelle 11), ist zu erkennen, dass sich die Werte geringfügig verringerten (Feld 1: -2,1 %; Feld 2: -0,8 %; Feld 3: -3,9 %; Feld 4: -4,9 %). Hingegen wies die ebene Oberfläche nach dem Beschichtungsprozess höhere Kontaktwinkel (bezogen auf den Mittelwert +27 %) auf als zuvor. Die Abbildungen 106-110 zeigen die Schattenbilder eines Wassertropfens auf den beschichteten laserstrukturierten Oberflächen und der beschichteten ebenen Oberfläche.

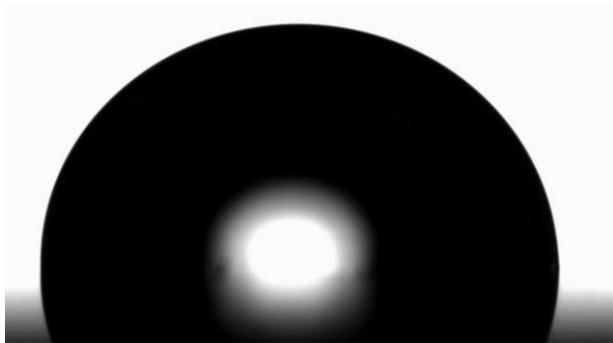


Abbildung 106: Wassertropfen auf ebener beschichteter Oberfläche (Messung 1)

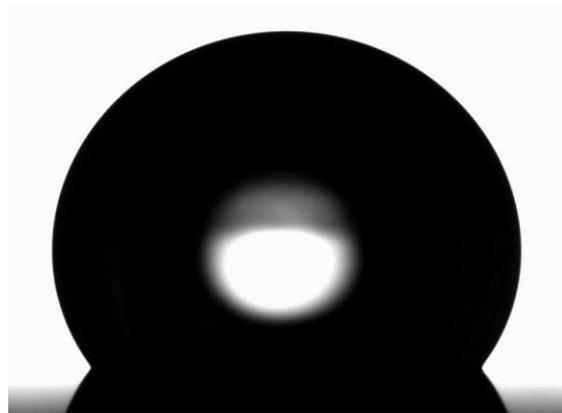


Abbildung 107: Wassertropfen auf beschichtetem Feld 1 (Messung 1)



Abbildung 108: Wassertropfen auf beschichtetem Feld 2 (Messung 1)



Abbildung 109: Wassertropfen auf beschichtetem Feld 3 (Messung 2)



Abbildung 110: Wassertropfen auf beschichtetem Feld 4 (Messung 2)

Weiters wurden an den beschichteten Oberflächen Kontaktwinkelmessungen mit einem Diiodmethantropfen durchgeführt. In Tabelle 14 sind die Ergebnisse der Messungen zusammengefasst.

Tabelle 14: Gemessene Kontaktwinkel mit einem 5 μl Diiodmethantropfen (Ebene Oberfläche vor und nach dem Sputtern bzw. laserstrukturierte Felder 1-4 nach dem Sputtern)

Kontaktwinkel mit Diiodmethan ($\theta_{\text{CH}_2\text{I}_2}$) [°]						
Messung	ebene O. (vor Sputtern)	ebene O. (nach Sputtern)	Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4
1	48,0	53,0	64,0	32,5	0,0	32,0
2	52,5	59,5	69,5	33,0	0,0	28,5
3	45,0	64,0	57,0	51,5	0,0	29,0
4	51,0	49,0	65,5	38,5	0,0	27,0
5	50,5	49,5	71,5	33,5	0,0	34,0
6	49,5	52,0	60,0	36,0	0,0	30,0
$\bar{x} \pm d_{\bar{x}}$	49,5 $\pm 1,9$	54,5 $\pm 4,8$	64,6 $\pm 4,3$	37,5 $\pm 5,0$	0,0 $\pm 0,0$	30,1 $\pm 2,0$

Die Abbildungen 111-114 zeigen die Schattenbilder der Diiodmethantropfen auf den beschichteten laserstrukturierten Oberflächen sowie der beschichteten ebenen Oberfläche.

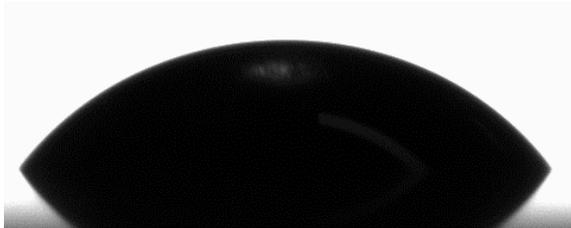


Abbildung 111: Diiodmethantropfen auf ebener beschichteter Oberfläche (Messung 1)



Abbildung 112: Diiodmethantropfen auf beschichtetem Feld 1 (Messung 1)



Abbildung 113: Diiodmethantropfen auf beschichtetem Feld 2 (Messung 6)



Abbildung 114: Diiodmethantropfen auf beschichtetem Feld 4 (Messung 2)

Im Vergleich zu den gemessenen Kontaktwinkeln der laserstrukturierten Oberflächen nach der Lagerung in einer Vakuumkammer (siehe Tabelle 12) ist, mit Ausnahme von Feld 3, eine deutliche Zunahme der Werte zu erkennen (Feld 1: +58,3 %; Feld 2: +48,2 %; Feld 3: +0,0 %; Feld 4: +85,8 %). Die Oberfläche von Feld 3 wird komplett benetzt. Die ebene Oberfläche weist nach dem Beschichtungsprozess geringfügig höhere Kontaktwinkel (bezogen auf den Mittelwert +10,1 %) auf.

9.2.2. Interpretation der experimentellen Messergebnisse

In Tabelle 15 sind die Mittelwerte der gemessenen Kontaktwinkel, die errechneten polaren und dispersiven Oberflächenenergieanteile sowie die Grenzflächenenergie zwischen einem Wassertropfen und den verschiedenen Oberflächen zusammengefasst. Es werden die Ergebnisse unmittelbar nach der Herstellung der Strukturen, nach der Lagerung in einer Vakuumkammer und nach der Beschichtung mit einer dünnen Platinschicht gegenübergestellt. In Abbildung 115 werden die gemessenen Kontaktwinkel aller relevanten Oberflächen dieses Kapitels grafisch dargestellt. Bei näherer Betrachtung der Messergebnisse der ebenen Edelstahloberfläche, ist eine deutliche Differenz zwischen einer polierten und einer nicht polierten Oberfläche zu erkennen. Eine polierte ebene Oberfläche weist sowohl mit Wasser als auch mit Diiodmethan eine geringere Benetzungsneigung auf. Der Einfluss des Beschichtungsprozesses wirkt sich bei einer nicht polierten, ebenen Edelstahloberfläche in einem deutlich ansteigenden Kontaktwinkel ($\Delta +20^\circ$) mit einem Wassertropfen und einem geringfügig größer werdenden Kontaktwinkel mit einem Diiodmethantropfen aus. Bei den Ergebnissen der laserstrukturierten Oberflächen (Feld 1-4) ist zu erkennen, dass die Lagerung der Oberflächen in einer Vakuumkammer nach ihrer Herstellung eine deutliche Veränderung des Benetzungsverhaltens des Wassertropfens von hydrophil zu hydrophob bzw. superhydrophob bewirkt. Nach dem durchgeführten Beschichtungsprozess (Sputtering) verringert sich der Kontaktwinkel mit einem Wassertropfen nur geringfügig. Die strukturierte Oberfläche von Feld 3 weist, im Vergleich zu den anderen strukturierten Feldern, zu jedem Messzeitpunkt mit einem Wassertropfen die höchsten Kontaktwinkel auf. Wird ein Diiodmethantropfen aufgebracht, ist bei den Feldern 2-4 zu erkennen, dass sich der Einfluss der Vakuumbehandlung und der Beschichtung im Vergleich zum Wassertropfen weitaus weniger drastisch auf die Kontaktwinkel auswirken. Ferner ist bei den Feldern 1 und 2 eine proportionale Steigerung des Kontaktwinkel zwischen den Messwerten nach der Herstellung, nach der Lagerung in der Vakuumkammer und nach dem Sputtern bemerkbar. Die Kontaktwinkelmessergebnisse des Diiodmethantropfens von Feld 3 unterscheiden sich gravierend von jenen der Felder 1,2 und 4. Einerseits ist der Kontaktwinkel nach der Herstellung geringer, andererseits tritt bei diesem Feld nach der Lagerung in der Vakuumkammer und nach dem Beschichtungsprozess eine komplette Benetzung auf.

Tabelle 15: Übersicht der gemessenen Kontaktwinkel und der resultierenden Oberflächen- und Grenzflächenenergien von verschiedenen ebenen und laserstrukturierten Oberflächen

	Ebene Oberfläche			Feld 1			Feld 2			Feld 3			Feld 4		
	poliert (Edelstahl)	nicht poliert (vor Sputtern) (Edelstahl)	nicht poliert (nach Sputtern) (Platin)	unmittelbar nach Herstellung	nach Lagerung in Vakuumkammer	nach Beschichtungsprozess	unmittelbar nach Herstellung	nach Lagerung in Vakuumkammer	nach Beschichtungsprozess	unmittelbar nach Herstellung	nach Lagerung in Vakuumkammer	nach Beschichtungsprozess	unmittelbar nach Herstellung	nach Lagerung in Vakuumkammer	nach Beschichtungsprozess
θ_{H_2O} [°]	95,5	73,4	93,2	10,4	135,7	132,8	14,5	146,3	145,0	33,4	161,5	155,2	10,6	148,0	140,7
$\theta_{CH_2I_2}$ [°]	72,5	49,4	54,5	20,1	40,8	64,6	15,5	25,3	37,5	9,8	0,0	0,0	15,0	16,2	30,1
σ_{SG}^D in J/m^2	0,0215	0,0346	0,0317	0,0478	0,0392	0,0259	0,049	0,046	0,0408	0,0501	0,0508	0,0508	0,0491	0,0488	0,0442
$\frac{\sigma_{SG}^D}{\sigma_{SG}}$ in %	89,6	82,5	96,1	60,4	84,9	90,0	62,2	78,2	79,4	69,1	72,4	74,3	61,6	77,2	81,3
σ_{SG}^P in J/m^2	0,0025	0,0073	0,0013	0,0313	0,007	0,0029	0,0298	0,0128	0,0106	0,0223	0,0193	0,0176	0,0305	0,0144	0,0102
$\frac{\sigma_{SG}^P}{\sigma_{SG}}$ in %	10,4	17,5	3,9	39,6	15,1	10,0	37,8	21,8	20,6	30,9	27,6	25,7	38,4	22,8	18,7
σ_{SG} in J/m^2	0,024	0,0419	0,033	0,0791	0,0462	0,0288	0,0788	0,0588	0,0514	0,0724	0,0701	0,0684	0,0796	0,0632	0,0544
σ_{SL} in J/m^2 (OWRK) (Festkörper – Wasser)	0,031	0,0211	0,0371	0,0074	0,0228	0,0299	0,0083	0,0172	0,0181	0,0116	0,0136	0,0148	0,0081	0,0166	0,0195

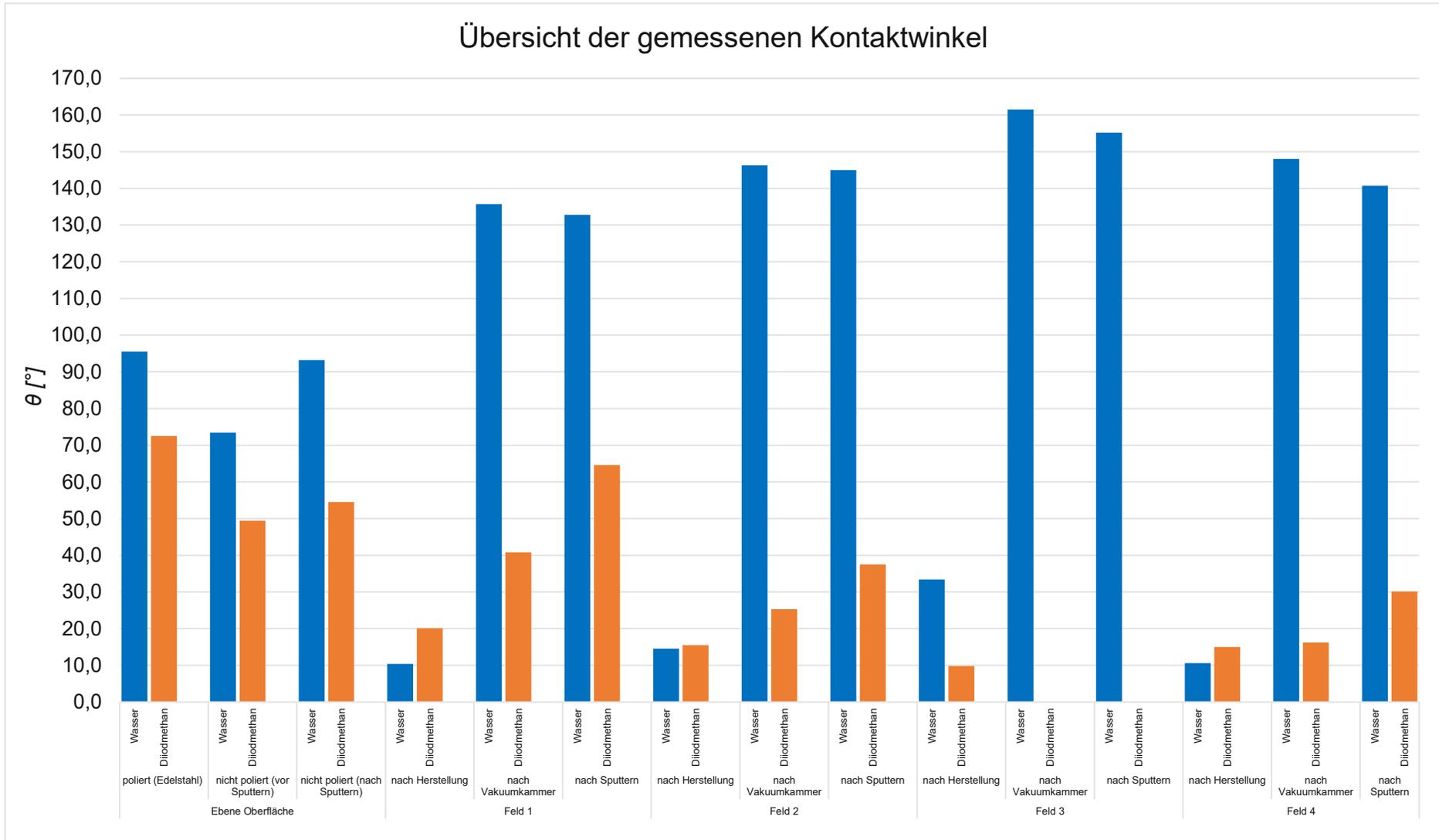


Abbildung 115: Grafische Darstellung der gemessenen Kontaktwinkel von verschiedenen ebenen und strukturierten Oberflächen mit Wasser- bzw. Diiodmethan

Die berechneten Oberflächenenergieanteile der ebenen und der laserstrukturierten Oberflächen sind in Abbildung 116 grafisch gegenübergestellt. Für die Berechnung wurde die OWRK-Methode angewendet. Da diese Methode nur für ideal ebene Oberflächen gültig ist, sind die Ergebnisse für strukturierte Oberflächen mit Vorsicht zu interpretieren. Aus der Abbildung geht hervor, dass eine ebene polierte Edelstahloberfläche im Vergleich zu einer nicht polierten eine um ca. die Hälfte reduzierte Oberflächenenergie aufweist. Da der mittlere Kontaktwinkel mit Wasser bei der ebenen polierten Oberfläche ($95,5^\circ$) im Vergleich zu der nicht polierten ($73,4^\circ$) deutlich höher ist, sind weniger Wechselwirkungen zwischen den beiden Phasen vorhanden und dies lässt die Differenz der Oberflächenenergie erklären. Das Polieren einer metallischen Oberfläche hat demnach einen deutlichen Einfluss auf dessen Benetzungsverhalten. Die ebene nicht polierte Oberfläche besitzt nach dem Beschichtungsvorgang eine um ca. 21 % geringere Oberflächenenergie, wobei sich der polare Anteil um ca. 82 % stark verringert hat. Da die polaren Wechselwirkungen den dispersiven, in Bezug auf die Bindungsstärke, überlegen sind, hat dieser Umstand einen höheren Kontaktwinkel zur Folge. Dieser ist ungefähr so groß wie jener der ebenen polierten Edelstahloberfläche ($93,2^\circ$).

Die laserstrukturierten Oberflächen weisen nach ihrer Herstellung, im Vergleich zu den weiteren Messzeitpunkten sehr hohe Oberflächenenergien auf ($0,07$ - $0,08$ J/m²). Dies ist mit dem sehr hydrophilen Benetzungsverhalten und daher mit den stark ausgeprägten Wechselwirkungen aller Felder mit den Flüssigkeiten zu diesem Messzeitpunkt zu erklären. Nach der Lagerung der strukturierten Oberflächen in einer Vakuumkammer ist der Anteil der polaren Oberflächenenergie σ_{SG}^P der Felder 1,2 und 4 deutlich gesunken (Feld 1: -77 %; Feld 2: -56 %; Feld 3: -13 %; Feld 4: -52 %). Der dispersive Oberflächenenergieanteil σ_{SG}^D verringert sich weniger stark bzw. bleibt annähernd konstant (Feld 1: -18 %; Feld 2: -6 %; Feld 3: +1 %; Feld 4: -0,5 %).

Nach dem Aufbringen einer dünnen Platinschicht auf die strukturierten Oberflächen verringern sich die Oberflächenenergien ein weiteres Mal. Hierbei sinkt der polare Anteil der Oberflächenenergie stärker als der dispersive (Feld 1: σ_{SG}^D (-34 %), σ_{SG}^P (-59 %); Feld 2: σ_{SG}^D (-11 %), σ_{SG}^P (-17 %); Feld 3: σ_{SG}^D (-0 %), σ_{SG}^P (-9 %); Feld 4: σ_{SG}^D (-10 %), σ_{SG}^P (-29 %)). Somit zeigen die strukturierten Oberflächen beim Beschichtungsprozess in Bezug auf die Veränderung der Oberflächenenergie ein ähnliches Verhalten wie die ebene Oberfläche, jedoch ist die Reduktion des polaren Oberflächenanteils nicht so stark ausgeprägt.

Es ist zu erkennen, dass sich die Oberflächenenergiwerte von Feld 3 im Vergleich zu den anderen laserstrukturierten Oberflächen, sowohl durch die Lagerung in der Vakuumkammer als auch durch den Beschichtungsprozess nur sehr geringfügig verändern. Ein Grund hierfür könnte die spezielle Oberflächenstruktur dieses Feldes darstellen, die sehr viele schmale

Vertiefungen besitzt, in denen die umgebende Luft eingeschlossen werden könnte. Daraus kann geschlossen werden, dass die Grenzfläche zwischen dem Wassertropfen und der Festkörperoberfläche verringert ist und die Wechselwirkungen zwischen den beiden Phasen beschränkt sind. Die Tabelle 8 (Kapitel 9.1) verdeutlicht, dass die Rauheitsparameter (S_a , S_z , S_{dr} , S_{dq}) von Feld 3 um ein Vielfaches größer sind als jene der anderen Oberflächen. Es ist nochmals darauf hinzuweisen, dass die OWRK-Methode zur Bestimmung der Oberflächenenergie nur für ideal ebene Oberflächen angewendet werden darf und die damit berechneten Werte für die laserstrukturierten Oberflächen nur Abhängigkeiten oder Verhaltensmuster aufzeigen können.

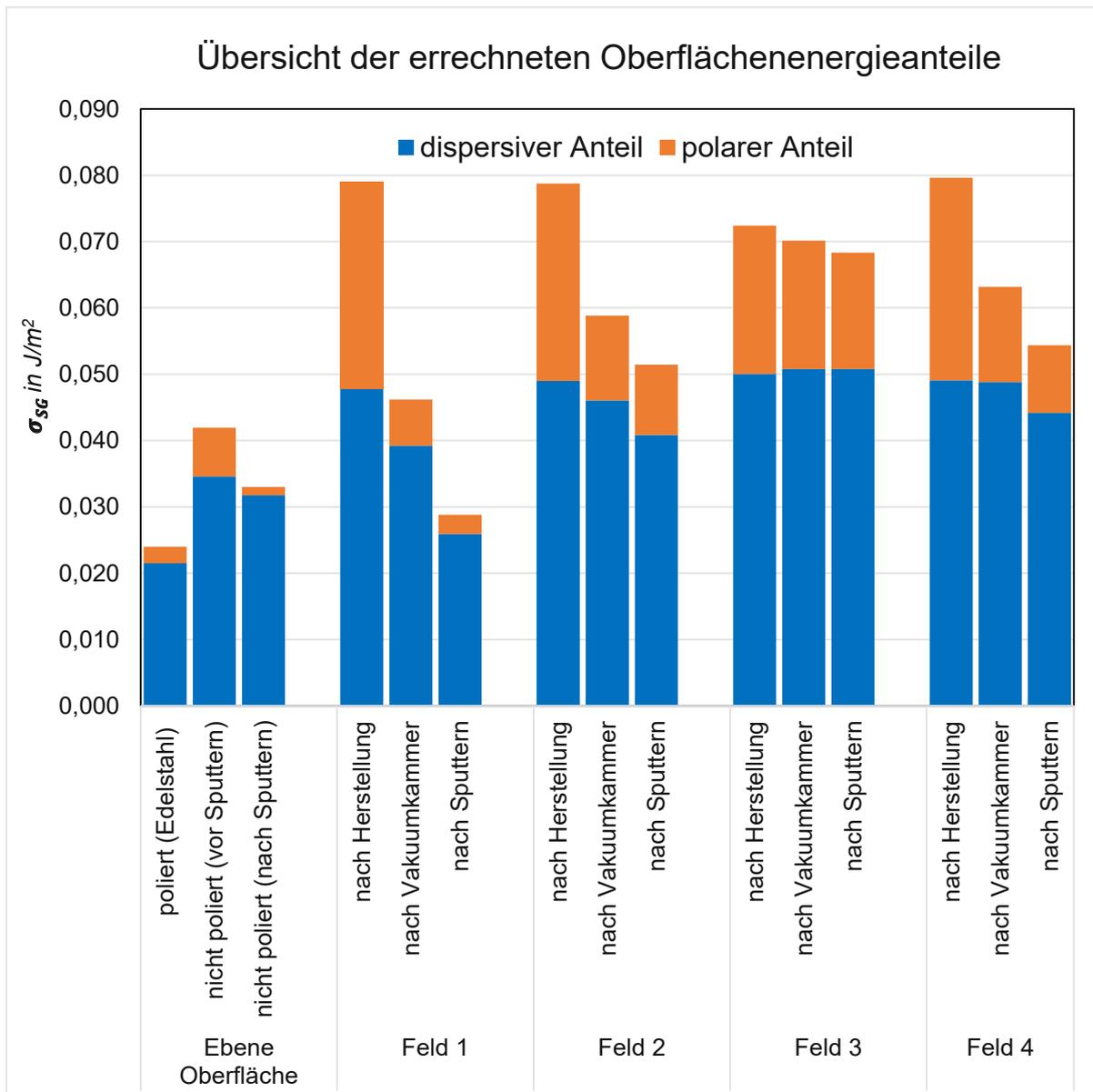


Abbildung 116: Gegenüberstellung der berechneten Oberflächenenergieanteile der verschiedenen Festkörperoberflächen zu verschiedenen Zeitpunkten

In Abbildung 117 sind die berechneten Grenzflächenenergien zwischen den Oberflächen und Wasser zu den verschiedenen Messzeitpunkten grafisch dargestellt. Für deren Ermittlung wird wieder die OWRK-Methode verwendet, die nur für ideal ebene Oberflächen zulässig ist. Somit ist auch hier Vorsicht bei der Interpretation der Ergebnisse von strukturierten Oberflächen geboten. Es ist zu erkennen, dass die Grenzflächenenergie bei allen angeführten Oberflächen durch den Beschichtungsvorgang ansteigt. Der Anstieg beträgt bei der ebenen Oberfläche +75 % und ist bei den laserstrukturierten Oberflächen deutlich geringer (Feld 1: +31 %; Feld 2: +5 %; Feld 3: +9 %; Feld 4: +18 %). Hingegen ist der Einfluss auf die Grenzflächenenergie durch die Lagerung in einer Vakuumkammer, bezogen auf den Zustand unmittelbar nach der Herstellung, mit Ausnahme von Feld 3, deutlich größer (Feld 1: +207 %; Feld 2: +108 %; Feld 3: +17 %; Feld 4: +105 %).

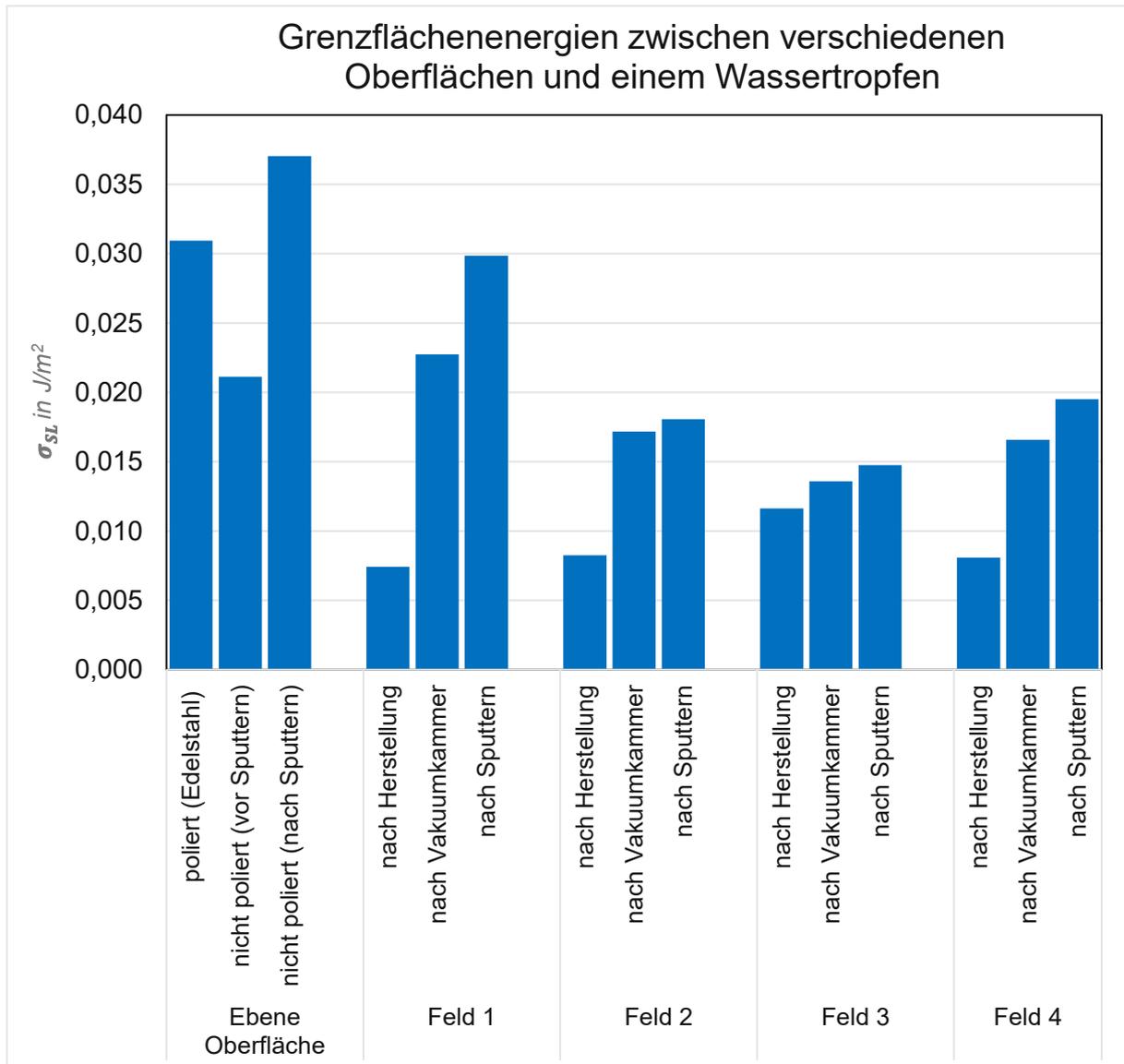


Abbildung 117: Gegenüberstellung der berechneten Grenzflächenenergien zwischen verschiedenen Oberflächen und einem Wassertropfen zu unterschiedlichen Zeitpunkten

9.3. Simulationen

9.3.1. Skalierung der Oberflächengeometrie

Um die numerischen Untersuchungen an laserstrukturierten Oberflächen durchführen zu können, wurden in einem ersten Schritt die Oberflächengeometrien der untersuchten Proben digitalisiert. Dabei hat sich gezeigt, dass eine exakte Darstellung der komplexen Oberflächenstrukturen aufgrund mehrerer Faktoren kaum realisierbar ist. Die erste Einschränkung bildet die begrenzte Auflösung des verwendeten optischen 3D Oberflächenmessgerätes, das zum Scannen der laserstrukturierten Oberflächen eingesetzt wurde. Damit können die feinen Nanostrukturen der verschiedenen Oberflächen nicht ausreichend genau abgebildet werden und dies führt zu einem Informationsverlust. Außerdem fand ein Datenverlust bei der Generierung der digitalisierten Oberfläche in einem STL-Format statt. Weiters entsteht eine Datenreduktion durch den Vernetzungsvorgang in OpenFOAM, da das Ausgangsnetz mit Hilfe des „snappyHexMesh“-Vernetzungswerkzeugs nicht exakt an die digitale Oberfläche angepasst werden kann. Je genauer die Oberflächenstruktur mit einer feineren Vernetzung angenähert wird, desto größer wird die Anzahl der verwendeten Zellen. Jede Verfeinerungsstufe lässt die Zellenanzahl außerordentlich ansteigen und dies hat eine massive Erhöhung des Rechenaufwandes und damit verbunden eine starke Verlängerung der Simulationszeiten zur Folge. Eine wichtige Anforderung an die im Zuge dieser Arbeit durchgeführten Simulationen war es daher, die Zellenanzahl niedrig zu halten und die Größenordnung aus dem Experiment zu übernehmen, um damit die Strukturierung der Oberfläche möglichst genau abzubilden. Da jedoch die Größenordnung des Tropfenvolumens aus dem Experiment und die der Oberflächenstrukturierung sehr stark voneinander abweichen (Faktor 1400), ist aufgrund der maximal zur Verfügung stehenden Rechenressourcen die genaue Abbildung des Experiments nicht möglich. Durch eine Vervielfachung des kleinen gescannten Feldausschnittes mithilfe des Programms Autodesk MeshMixer, war es zwar möglich eine versuchsähnliche Skalierung zu erzeugen, jedoch erhöhte sich die Zellenanzahl mit jeder Verfeinerungsstufe des Netzes so rasch, dass die Rechenkapazität erreicht wurde, bevor eine brauchbare Abbildung der Struktur zustande kam. Eine Beschränkung auf einen kleinen gescannten Ausschnitt der Oberfläche ermöglichte die Struktur mit einem feineren Netz (kleineren Zellen) genauer abzubilden, jedoch musste auch das Tropfenvolumen stark verringert werden. Somit war eine ähnliche Größenordnung wie im Experiment nicht mehr vorhanden. Da die Rechenressourcen im Rahmen dieser Diplomarbeit begrenzt waren und für eine experimentähnliche Skalierung nicht ausreichten, wurden die Simulationen in der Größenordnung der gescannten Oberflächen mit einem stark reduzierten Tropfenvolumen durchgeführt.

9.3.2. Case-Setup

Wie schon in Kapitel 5.1.2. erwähnt, kam das Vernetzungswerkzeug snappyHexMesh zur Anwendung. Damit war es möglich nicht-orthogonale Zellen zu erzeugen und die Oberflächenstruktur möglichst genau in der Domäne (Netz) abzubilden. Entscheidend war, dass mit diesem Werkzeug beide Seiten einer digitalisierten Oberfläche in einem zusammenhängendem Netz abgebildet werden konnten und die Geometrie der strukturierten Festkörperoberfläche nicht als Randbedingung implementiert werden musste. Es wurden eigene Zonen „cellZones“, bestehend aus definierten Zellen, für jede Seite (Festkörper und Gasphase) definiert. Somit wurden beide Seiten im endgültigen Netz mit einer verbindenden Grenzfläche, die die strukturierte Oberfläche abbildete, erhalten (siehe Abbildung 118).

```
refinementSurfaces
{
  laserstructured_surface
  {
    level (3 3);
    faceZone Top_Face;
    cellZone Top_Face;
    cellZoneInside inside;
  }
  laserstructured_surface
  {
    level (3 3);
    faceZone Bottom_Face;
    cellZone Bottom_Face;
    cellZoneInside inside;
  }
}
```

Abbildung 118: Auszug aus der snappyHexMeshDict-Datei. Es werden zwei verschiedene Zellzonen definiert. Eine beinhaltet die Zellen über der strukturierten Oberfläche (Luft) und die andere die Zellen unter dieser (Festkörper). In diesem Fall entsprechen die Flächen (Top_Face und Bottom_Face) den oberen und unteren Randflächen der Domäne, die in der blockMeshDict-Datei definiert wurden.

Diesen Zellzonen wurden in den „setFieldsDict“-Dateien (.preproc und .orig) die Eigenschaften der gewünschten Phase zugewiesen. Im Folgenden werden die wichtigsten Parametereinstellungen im Pre-Processing für die Simulationen des Benetzungsverhaltens von strukturierten Oberflächen erläutert:

- In der Datei „blockMeshDict.block3D“ wurde die Domäne durch einen Würfel mit einer Seitenlänge von 0,5 mm festgelegt. Die Seitenlänge einer Zelle des Ausgangsnetzes beträgt damit 0,02 mm.
- Der Radius des Flüssigkeitstropfens wurde in den „setFieldsDict“-Dateien mit 0,12 mm angegeben und das resultierende Tropfenvolumen beträgt 0,00724 mm³. Dieses ist deutlich geringer als bei den durchgeführten experimentellen Versuchen (1 – 10 µl).
- In der „snappyHexMeshDict“-Datei wurde der Wert für „nCellsBetweenLevels“ auf den Wert 3 gesetzt, sodass ein sprunghafter Übergang zwischen zwei Zellenverfeinerungsstufen vermieden wurde. In der Kategorie „refinementSurfaces“ wurden die

minimalen und maximalen Feinheitsgrade für die Vernetzung der strukturierten Oberfläche jeweils mit dem Wert 3 bestimmt. Somit konnte eine kleine Zellengröße im Bereich der Oberfläche garantiert werden und die Zellenanzahl blieb noch in einem annehmbaren Bereich (500000 – 1000000 Zellen). Weiters ist die Begrenzung der maximal auftretenden Nicht-Orthogonalität der Zellen (maxNonOrtho) ein entscheidender Parameter für eine stabil laufende Simulation. Dieser wurde mit 45 Grad festgelegt, da eine höhere Nicht-Orthogonalität der Zellen zu Problemen während der Simulation führte. Eine derartige Begrenzung wirkt sich jedoch nachteilig auf die Genauigkeit der Abbildung der digitalisierten Oberfläche durch die Vernetzung aus, da eckige Übergänge entstehen können.

- Der Flüssigkeitstropfen wurde, wie in den bisherigen Simulationen, mit einer dynamischen Netzverfeinerung an der Phasengrenze versehen.
- Die Oberflächenenergieanteile der laserstrukturierten Oberflächen entsprechen jenen der polierten ebenen Edstahlfläche ($\sigma_{SG}^D = 0,0215 \text{ J/m}^2$; $\sigma_{SG}^P = 0,0025 \text{ J/m}^2$). Als Flüssigkeit wurde herkömmliches Wasser verwendet (Oberflächenenergiewerte siehe Kapitel 3.3.1).

Die vernetzte laserstrukturierte Oberfläche von Feld 2 im Ausgangszustand der Simulation ist in den Abbildungen 119-121 dargestellt. In Abbildung 120 werden die vernetzte Festkörperoberfläche mittels OpenFOAM und die digitalisierte Referenzoberfläche gegenübergestellt. Es ist eine ähnliche Strukturierungen der beiden Oberflächen zu erkennen, jedoch können Abrundungen mit einem sehr kleinen Krümmungsradius, aufgrund der Größe und der begrenzten Nicht-Orthogonalität der Zellen, nicht genau abgebildet werden.



Abbildung 119: Isometrische Darstellung der vernetzten Festkörperoberfläche von Feld 2

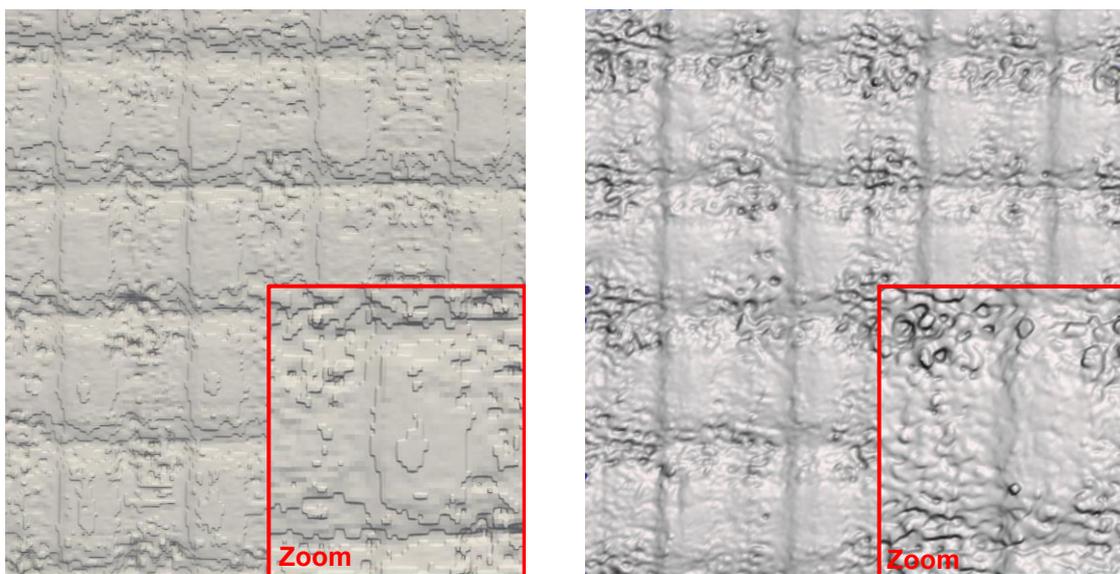


Abbildung 120: Vergleich der vernetzten strukturierten Oberfläche von Feld 2 mittels OpenFOAM (links) mit der digitalisierten Referenzoberfläche dargestellt im Programm MeshMixer (rechts)

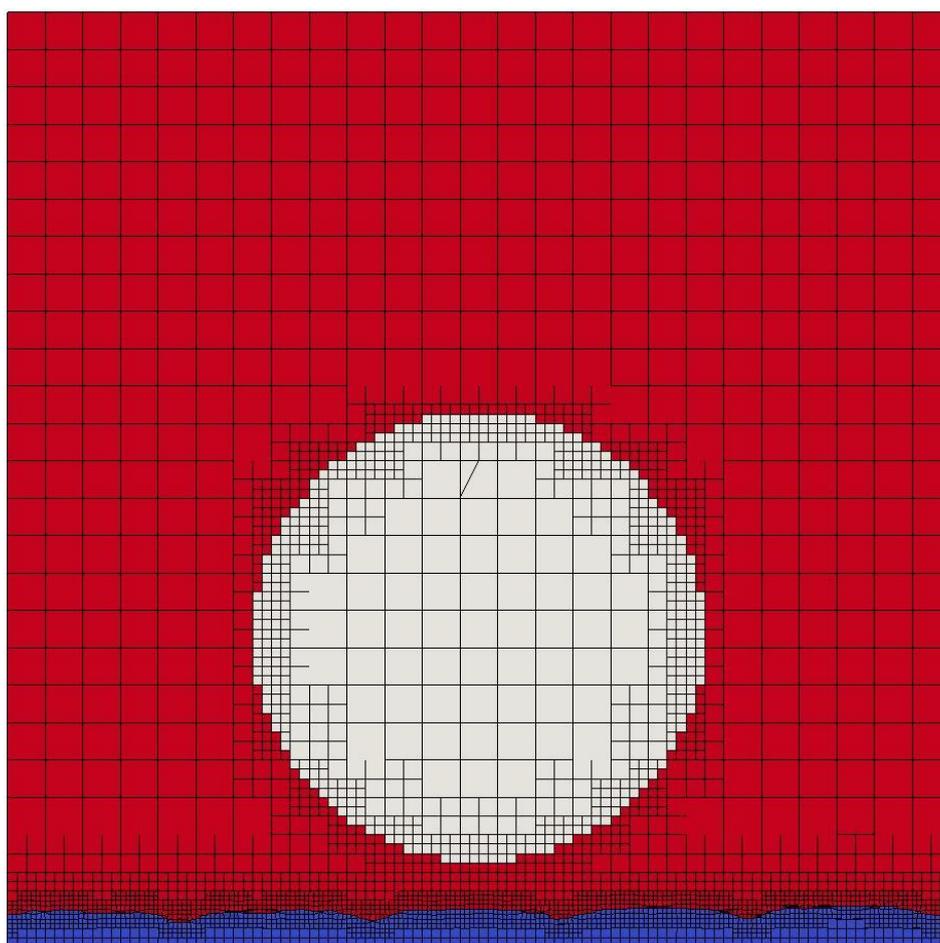


Abbildung 121: Mittiger Schnitt der Domäne in y-z-Ebene. Vernetzung des Ausgangszustandes einer Simulation des fallenden Wassertropfens (grau) auf die Festkörperoberfläche von Feld 2 (blau) in umgebender Gasphase (rot).

Die vernetzte laserstrukturierte Oberfläche von Feld 3 im Ausgangszustand der Simulation ist in den Abbildungen 122-124 dargestellt. Die Höhenunterschiede der Struktur konnten in der vernetzten Oberfläche gut abgebildet werden. Auch der Vergleich mit der digitalisierten Referenzoberfläche weist hohe Ähnlichkeit auf (siehe Abbildung 123).

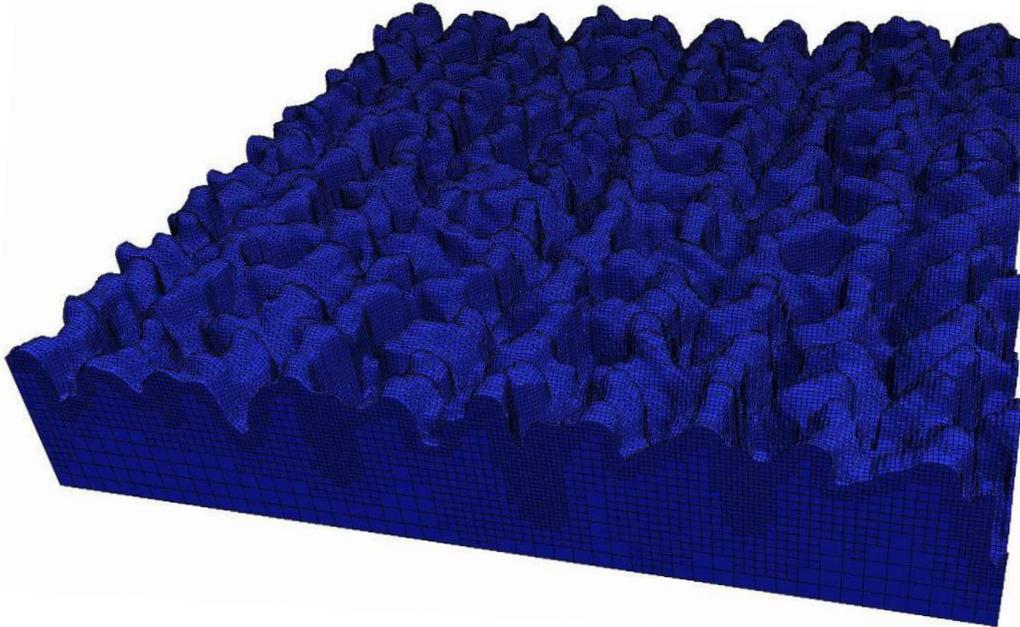


Abbildung 122: Isometrische Darstellung der vernetzten Festkörperoberfläche von Feld 3

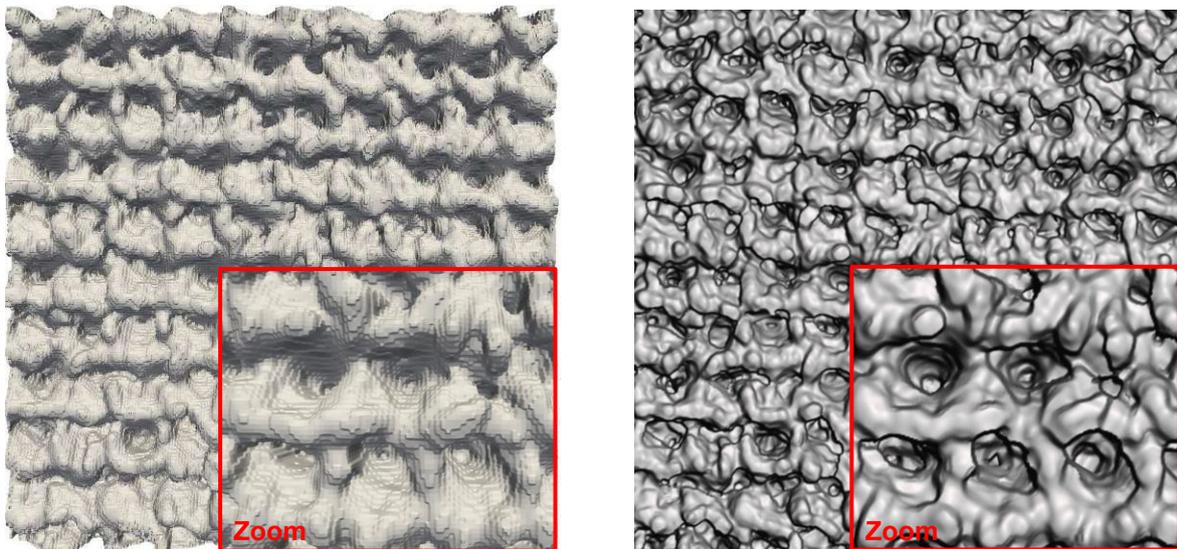


Abbildung 123: Vergleich der vernetzten strukturierten Oberfläche von Feld 3 mittels OpenFOAM (links) mit der digitalisierten Referenzoberfläche dargestellt im Programm MeshMixer (rechts)

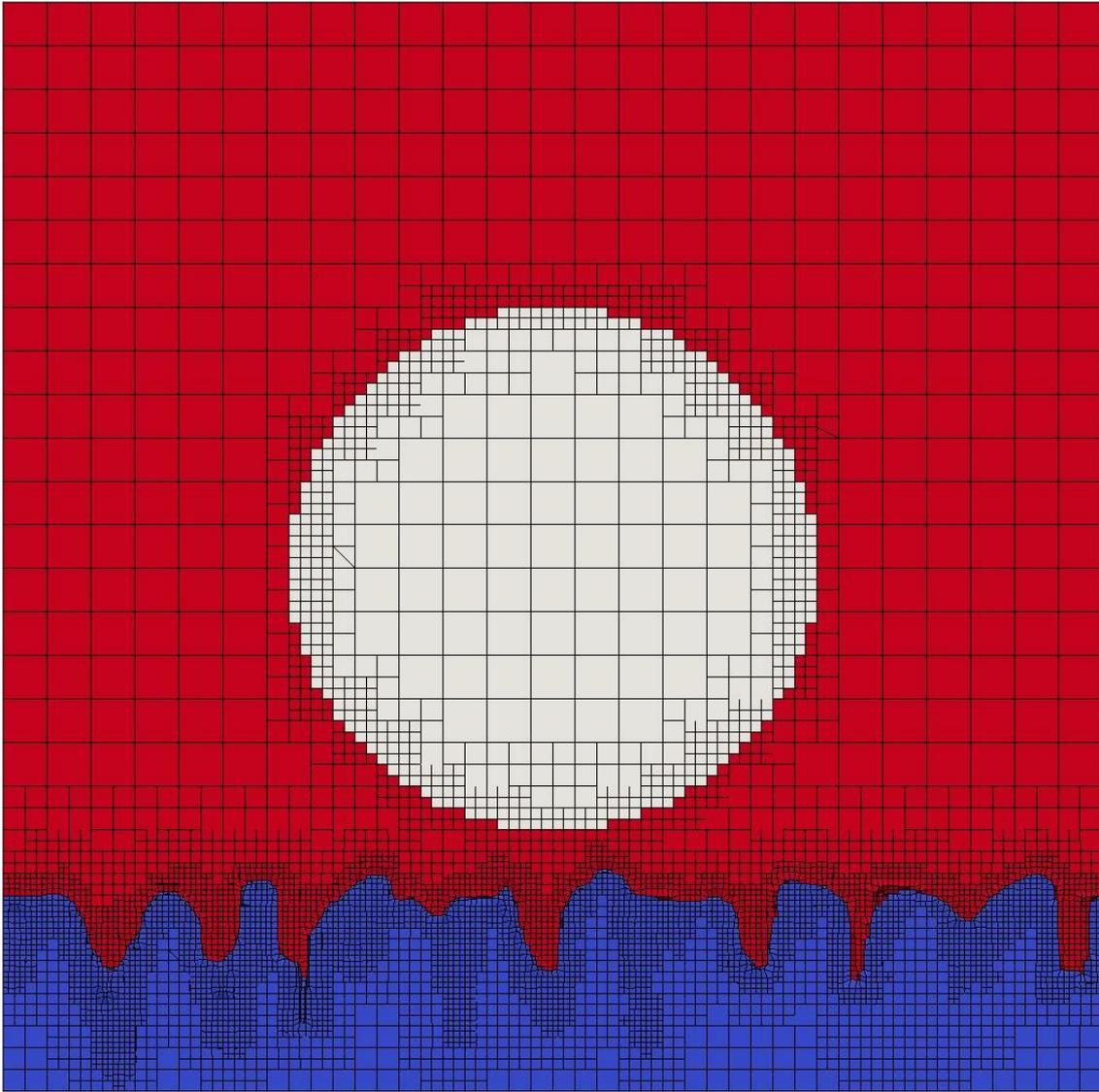


Abbildung 124: Mittlerer Schnitt der Domäne in y - z -Ebene. Vernetzung des Ausgangszustandes einer Simulation des fallenden Wassertropfens (grau) auf die Festkörperoberfläche von Feld 3 (blau) in umgebender Gasphase (rot).

Die vernetzte laserstrukturierte Oberfläche von Feld 4 im Ausgangszustand der Simulation ist in den Abbildungen 125-127 dargestellt. Auch bei dieser vernetzten Oberfläche ist der Bezug auf die Referenzoberfläche zu erkennen, jedoch treten auch hier Probleme bei der Abbildung von starken Neigungsunterschieden auf.



Abbildung 125: Isometrische Darstellung der vernetzten Festkörperoberfläche von Feld 4

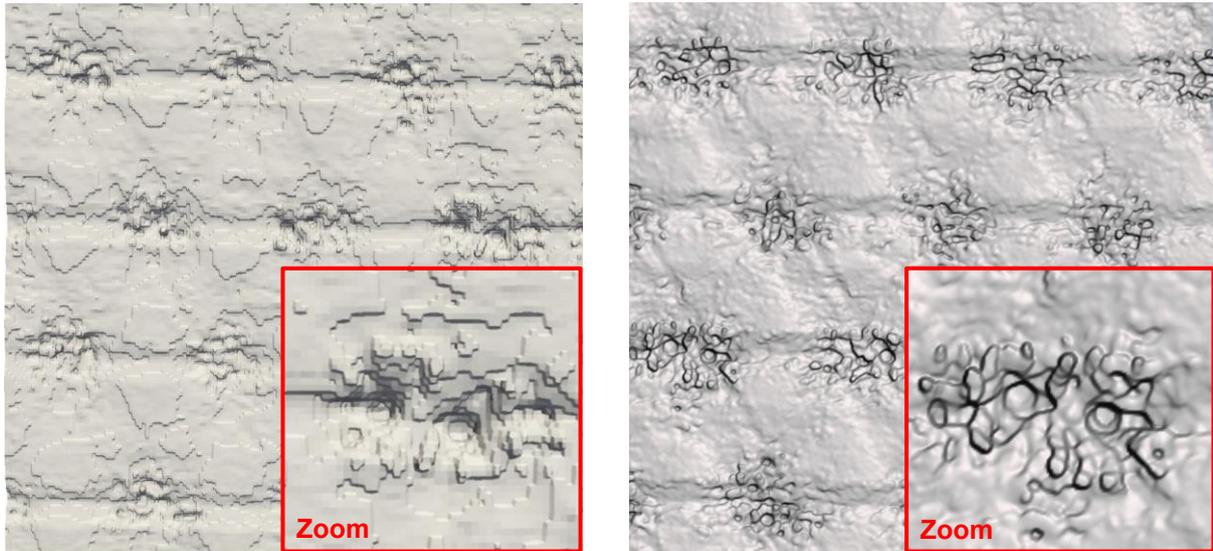


Abbildung 126: Vergleich der vernetzten strukturierten Oberfläche von Feld 4 mittels OpenFOAM (links) mit der digitalisierten Referenzoberfläche dargestellt im Programm MeshMixer (rechts)

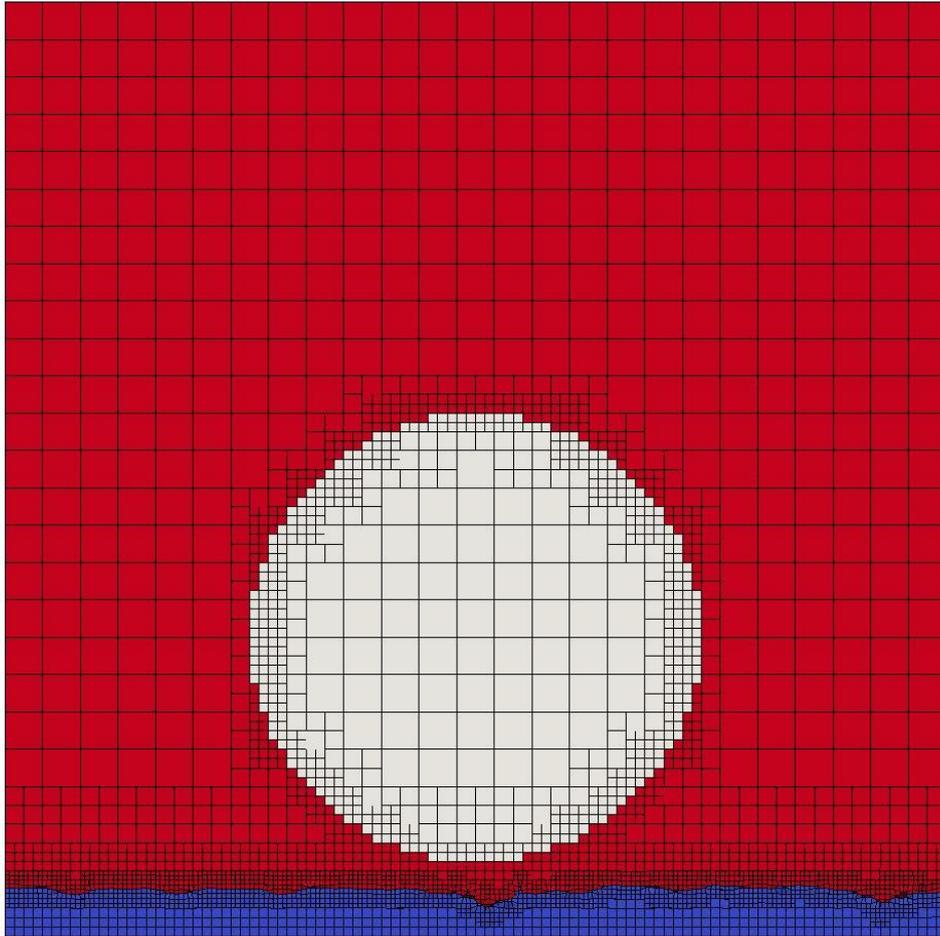


Abbildung 127: Mittlerer Schnitt der Domäne in y - z -Ebene. Vernetzung des Ausgangszustandes einer Simulation des fallenden Wassertropfens (grau) auf die Festkörperoberfläche von Feld 2 (blau) in umgebender Gasphase (rot).

Zusammenfassend ist zu sagen, dass die kleinen Ausschnitte der laserstrukturierten Oberflächen trotz der begrenzten Ressourcen (Zellenanzahl) annehmbar vernetzt wurden und der Informationsverlust der Oberflächengeometrie relativ klein gehalten werden konnte.

9.3.3. Simulationsergebnisse

Die folgenden Abbildungen 128-137 repräsentieren nacheinander die Ergebnisse der Simulationen für die Felder 2 bis 4, dargestellt mit dem Programm ParaView. Es wird die Zellenanordnung zu einem Zeitpunkt (ca. 0,002 Sekunden nach dem Ausgangszustand), bei dem sich ein stabiler Kontaktwinkel eingestellt hat, gezeigt. Zu erwähnen ist, dass in allen Simulationen für die Oberflächenenergieanteile der laserstrukturierten Oberflächen jene der polierten ebenen Edelmetalloberfläche herangezogen wurden. Die Abbildungen 128-130 stellen die Simulationsergebnisse von Feld 2 dar. Mit Ausnahme der zwei kleinen Lufteinschlüsse, die in Abbildung 128 zu sehen sind, stehen der Tropfen und die Oberfläche vollständig in Kontakt.

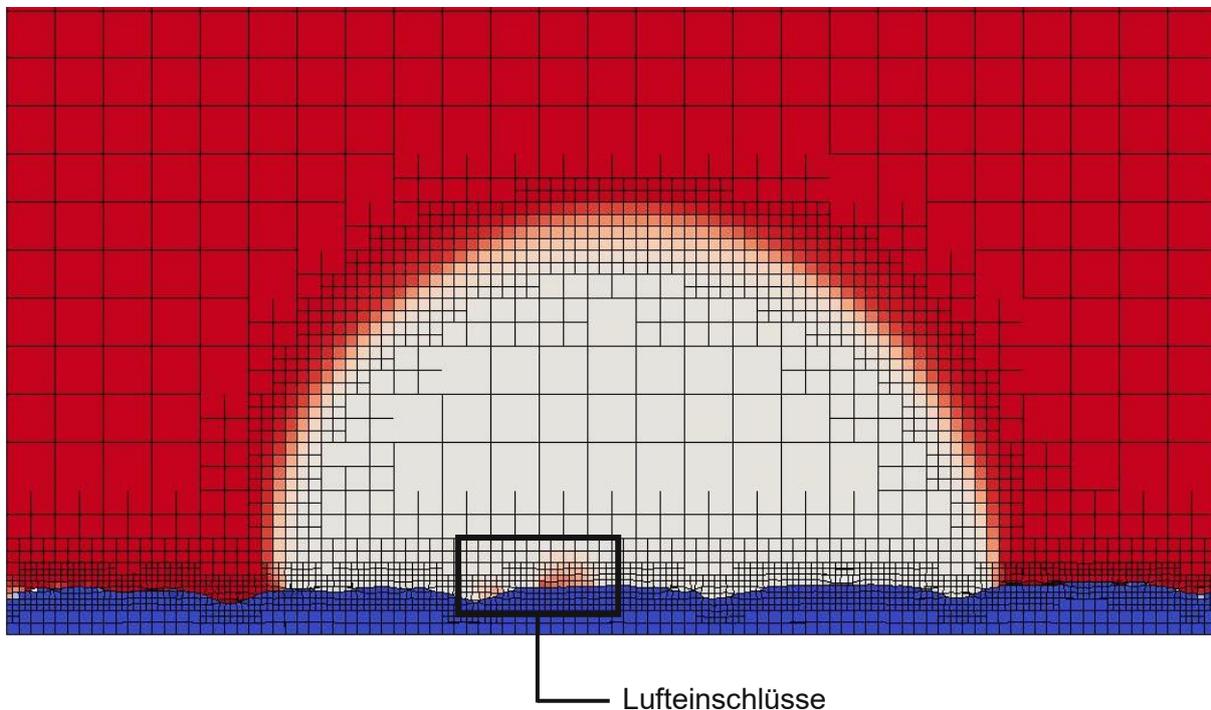


Abbildung 128: Mittlerer Schnitt der Domäne in y - z -Ebene am Ende der Simulation. Der Wassertropfen (grau) benetzt die Festkörperoberfläche von Feld 2 (blau) in umgebender Gasphase (rot)

In der Ansicht von oben auf den liegenden Wassertropfen sind in den Randzonen der Festkörperoberfläche unerwünschte Phasenumwandlungen zu erkennen (siehe Abbildung 129). Die Abweichung von der Kreisform ist auf die Positionierung des Tropfens in Bezug auf die Oberflächenstrukturierung zurückzuführen.

unerwünschte
Phasenumwandlung

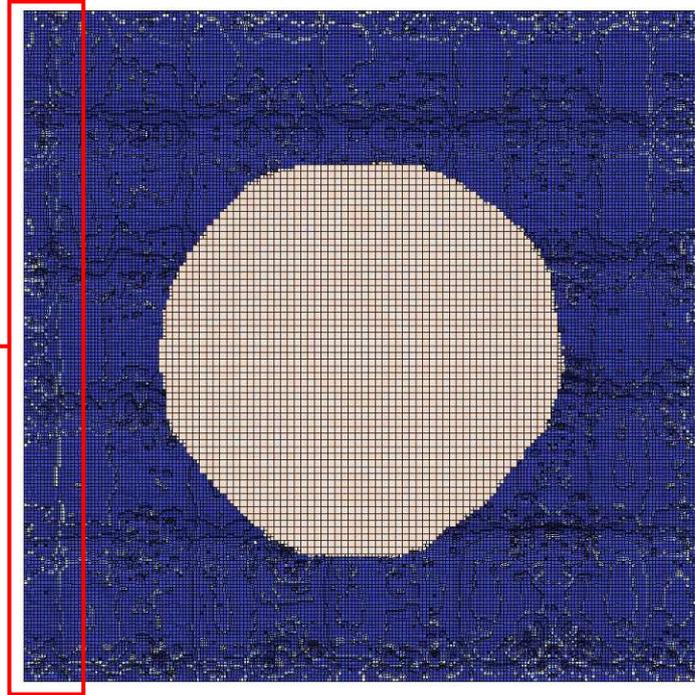


Abbildung 129: Ansicht von oben auf den liegenden Wassertropfen (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 2 (blau). Unerwünschte Phasenumwandlungen in den Randzonen der Festkörperoberfläche (grau dargestellte Zellen am Rand).

Die isometrische Ansicht des liegenden Wassertropfens auf der laserstrukturierten Oberfläche verdeutlicht einerseits die Detailliertheit des Modells und andererseits die Ähnlichkeit der Größenordnungen von Wassertropfen und Oberflächenstrukturen (siehe Abbildung 130).

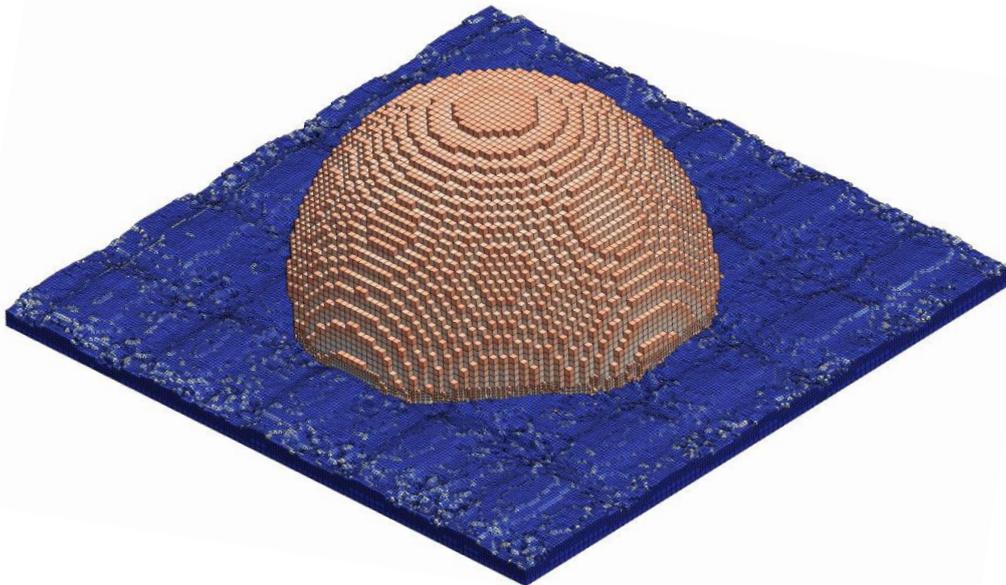


Abbildung 130: Isometrische Ansicht des liegenden Wassertropfens (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 2 (blau)

Die Simulationsergebnisse von Feld 3 sind in den Abbildungen 131-134 zu sehen. Durch die grobe Strukturierung der Oberfläche bleiben Lufteinschlüsse in den Vertiefungen unterhalb des Tropfens bestehen (siehe Abbildungen 131 und 134). Diese sind auch in Realität zu erwarten, wurden im Zuge der experimentellen Versuche jedoch nicht überprüft. Ähnlich den Ergebnissen von Feld 2, sind unerwünschte Phasenumwandlungen in den Randzonen der Festkörperoberfläche feststellbar (siehe Abbildung 132). Die Abweichung von der Kreisform ist auf die Positionierung des Tropfens in Bezug auf die sehr grobe Oberflächenstrukturierung zurückzuführen.

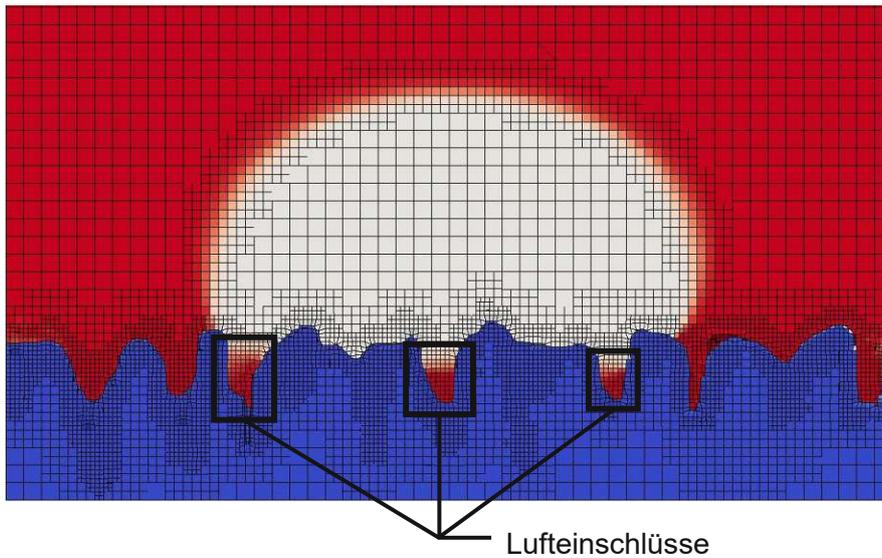


Abbildung 131: Mittiger Schnitt der Domäne in y-z-Ebene am Ende der Simulation. Der Wassertropfen (grau) benetzt die Festkörperoberfläche von Feld 3 (blau) in umgebender Gasphase (rot). Lufteinschlüsse sind deutlich in den Vertiefungen unterhalb des Tropfens zu erkennen.

unerwünschte
Phasenumwandlung

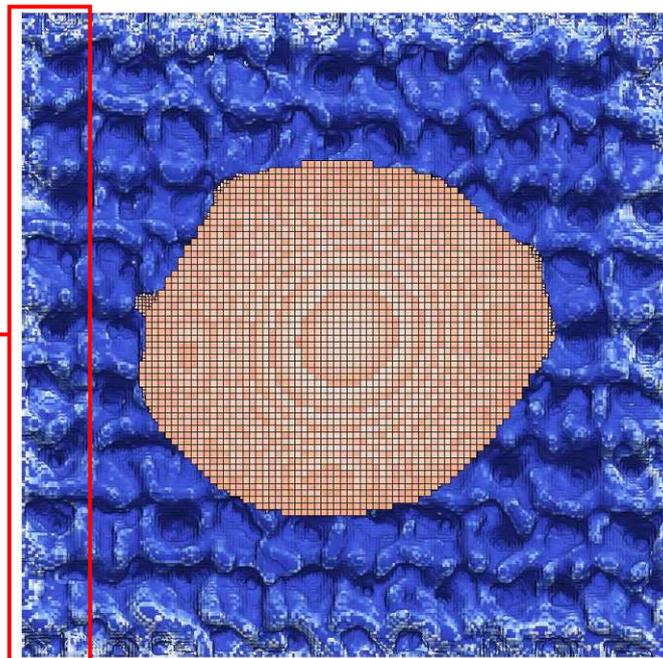


Abbildung 132: Ansicht von oben auf den liegenden Wassertropfen (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 3 (blau). Unerwünschte Phasenumwandlungen in den Randzonen der Festkörperoberfläche (grau dargestellte Randzellen).

In der isometrischen Ansicht des liegenden Wassertropfens auf der laserstrukturierten Oberfläche ist zu erkennen, dass die Größenordnungen von Wassertropfen und Oberflächenstrukturen ähnlich sind (siehe Abbildung 133). Die ausgebildeten Lufteinschlüsse in den Vertiefungen der Struktur unterhalb des Tropfens sind in Abbildung 134 verdeutlicht.

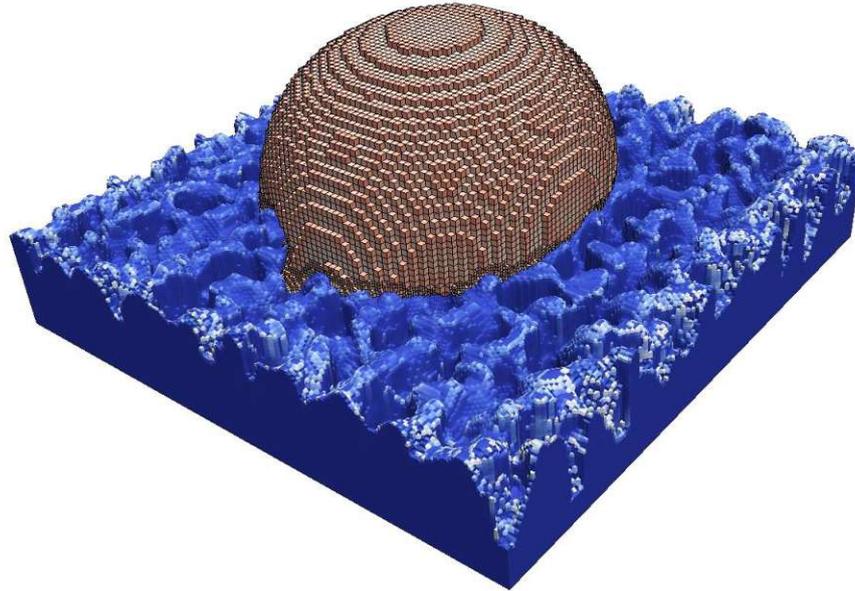


Abbildung 133: Isometrische Ansicht des liegenden Wassertropfens (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 3 (blau)

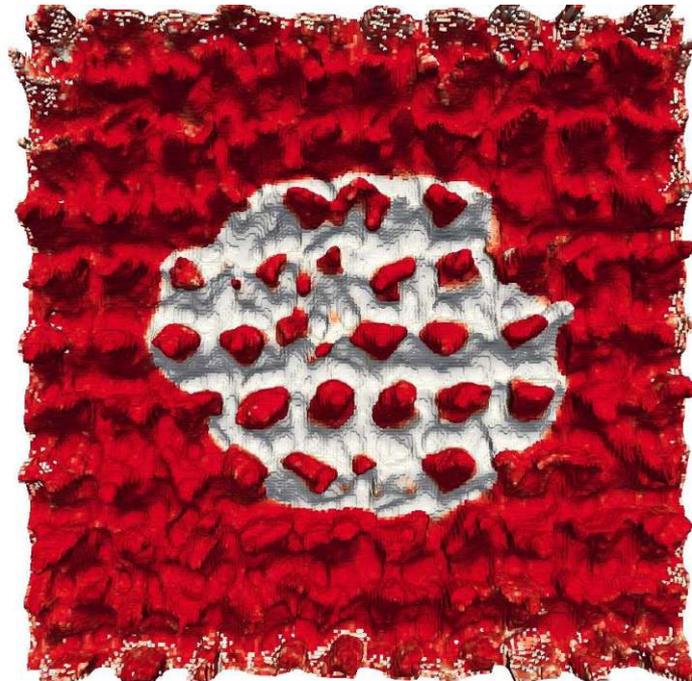


Abbildung 134: Ansicht von unten auf den liegenden Wassertropfen (grau) und die Gasphase (rot). Die laserstrukturierte Oberfläche von Feld 3 ist nicht dargestellt. Die Lufteinschlüsse in den Vertiefungen der Struktur unterhalb des Wassertropfens sind gut zu erkennen (rot).

Die Abbildungen 135-137 stellen die Simulationsergebnisse von Feld 4 dar. Das Benetzungsverhalten ist jenem von Feld 2 sehr ähnlich, da es sich wiederum um eine sehr fein strukturierte Oberfläche handelt.

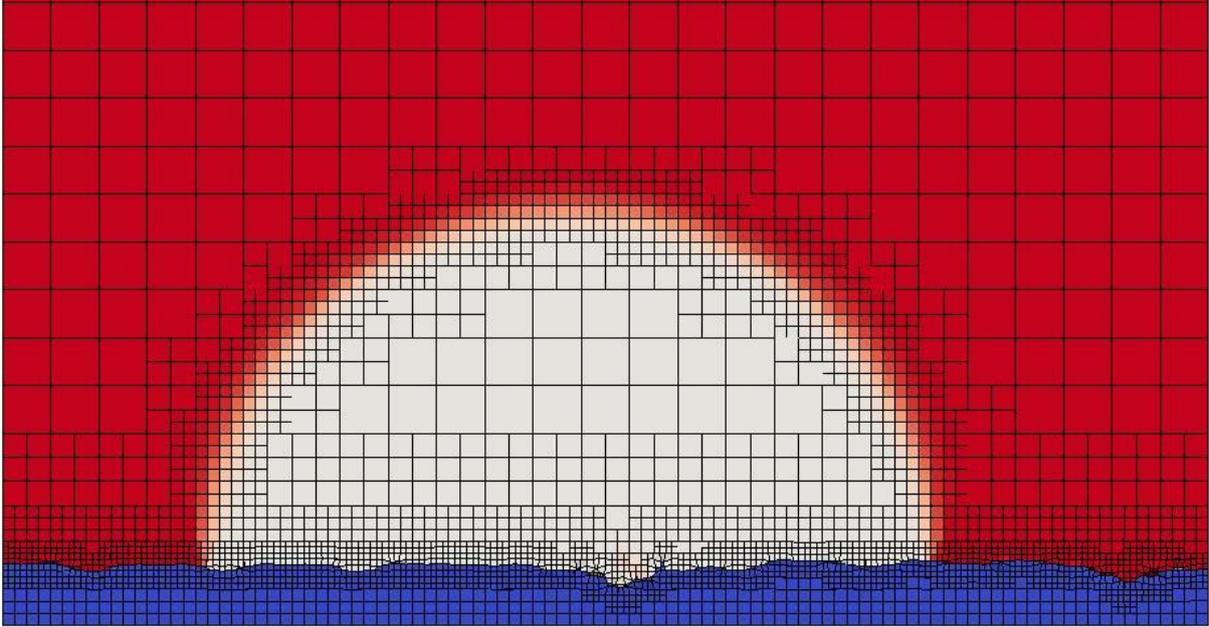


Abbildung 135: Mittlerer Schnitt der Domäne in y-z-Ebene am Ende der Simulation. Der Wassertropfen (grau) benetzt die Festkörperoberfläche von Feld 4 (blau) in umgebender Gasphase (rot)

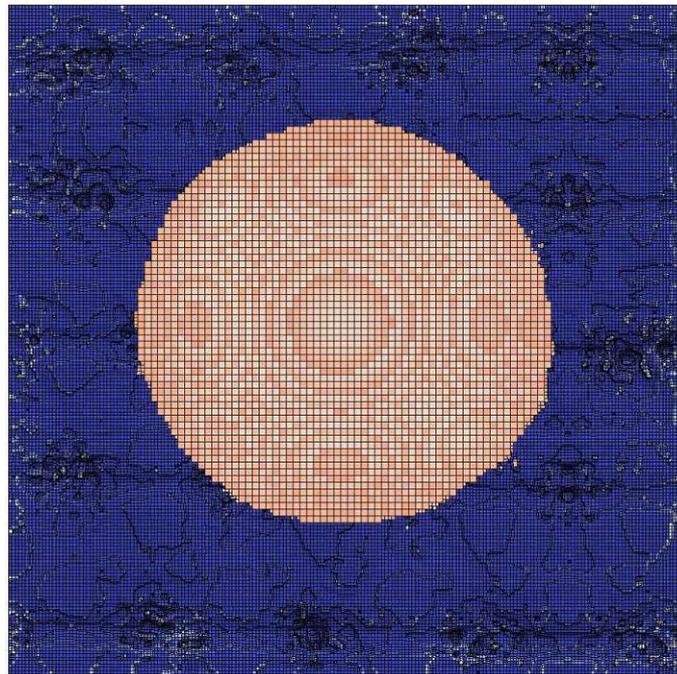


Abbildung 136: Ansicht von oben auf den liegenden Wassertropfen (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 4 (blau). Unerwünschte Phasenumwandlungen in den Randzonen der Festkörperoberfläche (grau dargestellte Zellen am Rand).

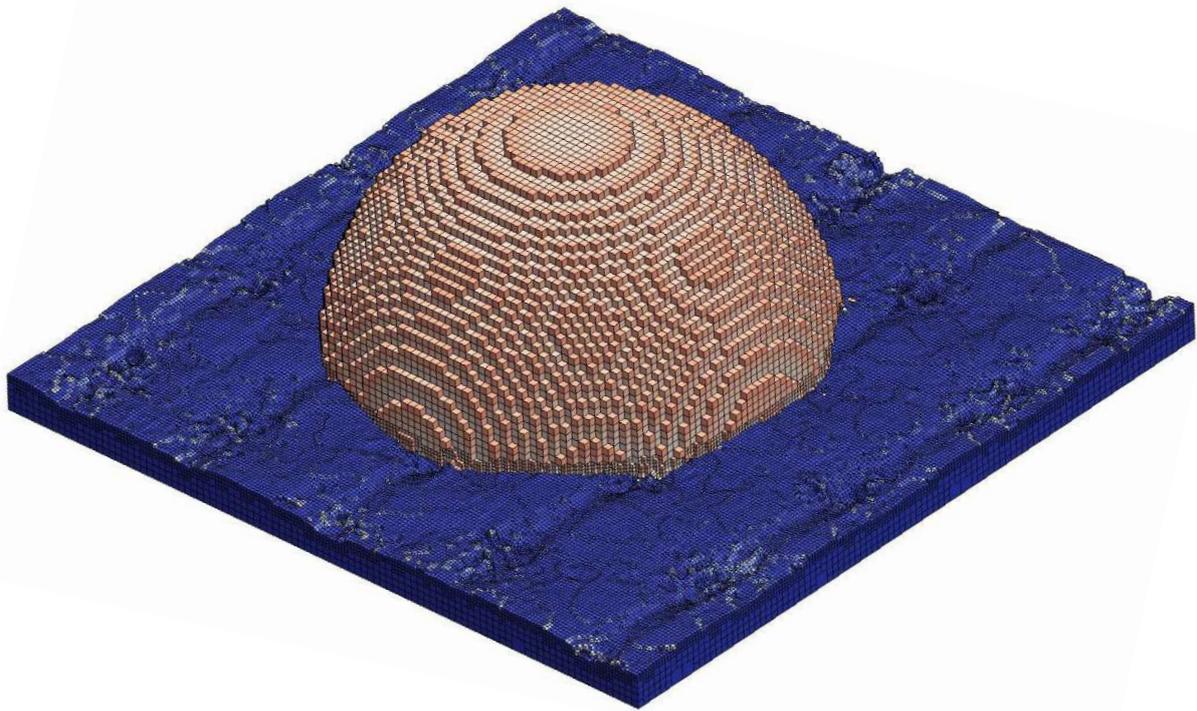


Abbildung 137: Isometrische Ansicht des liegenden Wassertropfens (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 4 (blau)

In allen Simulationen ist zu erkennen, dass es vorwiegend in den Randbereichen der Festkörperphase und in den stark nicht-orthogonalen Zellen zu unerwünschten Phasenumwandlungen kommt. Dies ist unter anderem durch die Wahl der Randbedingungen und die Auswahl der Diskretisierungsmodelle erklärbar.

9.4. Vergleich der Versuchs- und Simulationsergebnisse

In den folgenden Abbildungen 138-140 werden die Benetzungszustände von Wassertropfen auf den laserstrukturierten Oberflächen der Felder 2-4 im Experiment (nach der Lagerung der Oberflächen in einer Vakuumkammer) mit den zugehörigen numerischen Ergebnissen verglichen. Für die Bestimmung der Kontaktwinkel aus den Simulationsergebnissen wurde ein Schwarz-Weiß-Kontrast und eine hohe Auflösung, wie in Kapitel 7.2.2. beschrieben, generiert.

Wassertropfen auf der Oberfläche von Feld 2

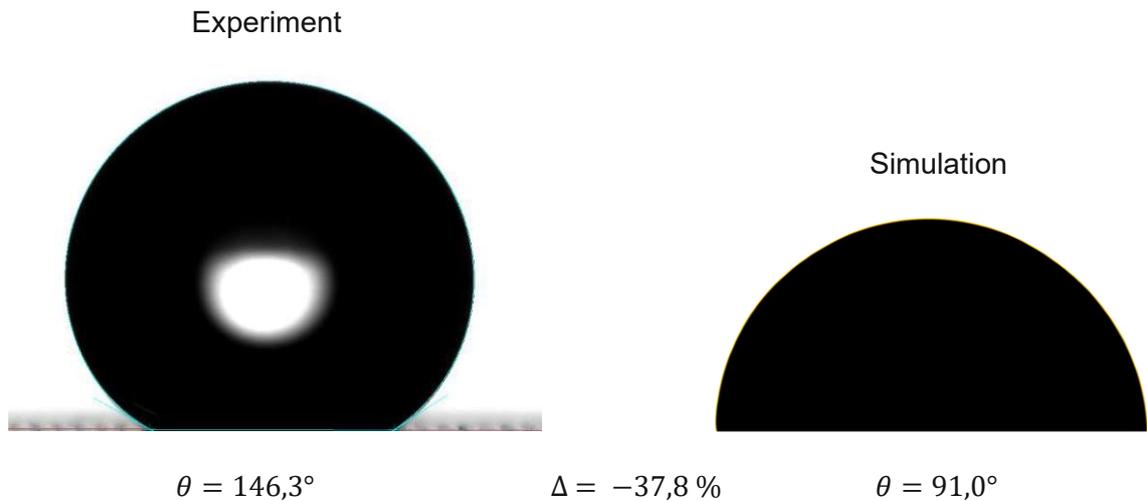


Abbildung 138: Gegenüberstellung der gemessenen Kontaktwinkel eines Wassertropfens auf der Oberfläche von Feld 2: Experiment (links), Simulation (rechts)

Wassertropfen auf der Oberfläche von Feld 3

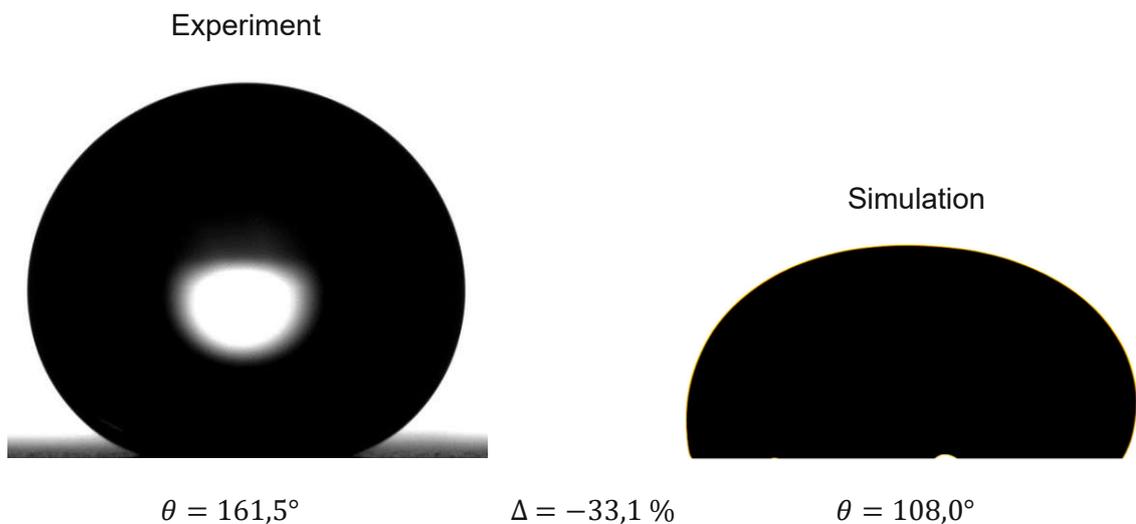


Abbildung 139: Gegenüberstellung der gemessenen Kontaktwinkel eines Wassertropfens auf der Oberfläche von Feld 3: Experiment (links), Simulation (rechts)

Wassertropfen auf der Oberfläche von Feld 4

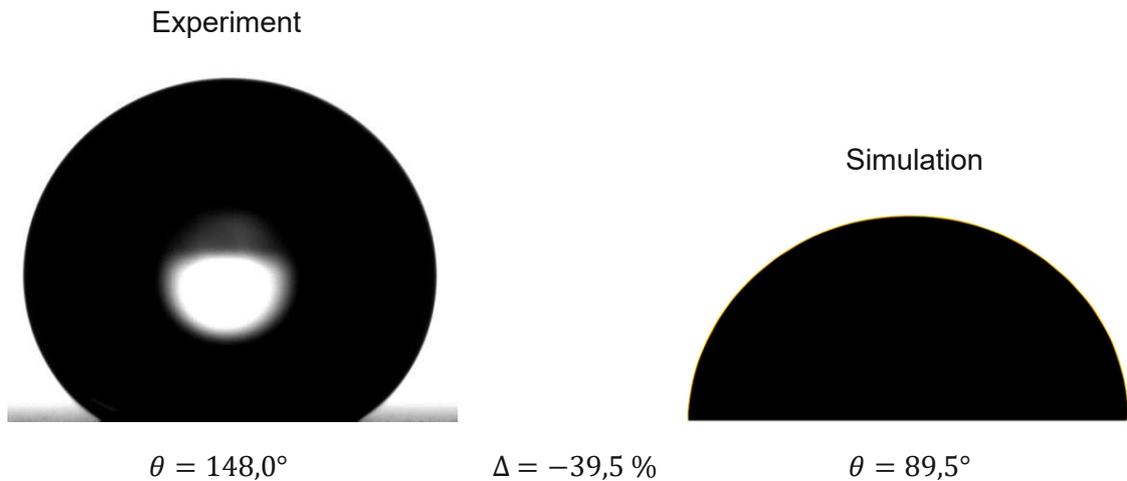


Abbildung 140: Gegenüberstellung der gemessenen Kontaktwinkel eines Wassertropfens auf der Oberfläche von Feld 4: Experiment (links), Simulation (rechts)

Die Gegenüberstellungen zeigen, dass die Kontaktwinkel in allen Simulationen deutlich geringer sind als jene der experimentellen Versuche. Es ist anzunehmen, dass das stark unterschiedliche Größenverhältnis des Tropfenvolumens zwischen Experiment und Simulation einen deutlichen Einfluss auf das Benetzungsverhalten aufweist. Ferner ist bei den Feldern 2 und 4 anzumerken, dass die sehr feinen Oberflächenstrukturen durch die angewandte Vernetzung nicht exakt abgebildet werden konnten. Daher ergaben sich Kontaktwinkel, die jenen der ideal ebenen Edelstahloberfläche mit derselben Oberflächenenergie, ähnlich sind ($95,5^\circ$ vgl. Tabelle 3). Durch die grobe Topografie bei Feld 3 konnte die Struktur der Oberfläche durch die Vernetzung genauer abgebildet werden und eine Erhöhung des Kontaktwinkels, im Vergleich zu Feld 2 und 4, wurde festgestellt.

10. Zusammenfassung, Fazit und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden experimentelle, analytische und numerische Untersuchungen zum Benetzungsverhalten von ebenen und strukturierten Festkörperoberflächen durchgeführt. Die Methode des liegenden Tropfens (Sessile-Drop-Methode) wurde für experimentelle Untersuchungen herangezogen. Die numerischen Simulationen wurden mit der CFD-Software OpenFOAM umgesetzt. Mit den gemessenen Kontaktwinkeln der realen Oberflächen wurde mit der OWRK-Methode analytisch auf die anfangs unbekanntem polaren und dispersiven Oberflächenenergieanteile des Festkörpers geschlossen. Anschließend wurde die Möglichkeit geschaffen, beide experimentell ermittelten Oberflächenenergieanteile (polar und dispersiv) separat in das Simulations-Setup zu implementieren. Weiters wurde auch die OWRK-Methode zur Berechnung der Grenzflächenenergien im Solver eingefügt und das modifizierte Simulations-Setup bei ebenen, regelmäßig strukturierten und laserstrukturierten Oberflächen angewendet.

Der Vergleich der Simulationsergebnisse und der experimentellen Werte der ebenen Oberflächen (verschiedene Metalle und Polystyrol) hat gezeigt, dass deren Benetzungsverhalten mit einer hohen Genauigkeit in den Simulationen wiedergegeben werden konnte. Nur bei einer untersuchten ebenen Glasoberfläche kam es zu einer etwas größeren Abweichung der Ergebnisse.

Ferner wurde untersucht, wie sich der topografische Einfluss von regelmäßig strukturierten Oberflächen im Vergleich zu ideal ebenen Oberflächen in einer Simulation auswirkt. Als regelmäßige Oberflächenstruktur wurde eine kubische Mikrosäulenordnung gewählt, da hierfür auch analytische Ergebnisse zum Vergleich berechnet werden konnten. Die Theorien nach Wenzel und Cassie-Baxter lieferten analytische Zusammenhänge zwischen den Kontaktwinkeln der ideal ebenen und der regelmäßig strukturierten Oberflächen. Es wurde ebenfalls der kritische Kontaktwinkel, der den Übergang von einem Wenzel- zu einem Cassie-Baxter-Zustand kennzeichnet, ermittelt. Der Vergleich der analytischen Ergebnisse und der Simulationsergebnisse hat gezeigt, dass deren Verläufe eine gewisse Ähnlichkeit aufweisen, sich jedoch große Abweichungen im Bereich des kritischen Kontaktwinkels ergaben, die numerisch erst bei höheren Kontaktwinkeln festgestellt werden konnten. Die erlangten Simulationsergebnisse, die einen Cassie-Baxter Zustand vorweisen konnten, wichen nur geringfügig von den zugehörigen analytischen Ergebnissen ab.

Anschließend wurde das Benetzungsverhalten einer Edelstahlprobe mit vier unterschiedlich laserstrukturierten Feldern untersucht. Hierbei wurden zu drei unterschiedlichen Zeitpunkten Kontaktwinkelmessungen durchgeführt. Unmittelbar nach der Herstellung der Oberflächenstruktur mittels Ultrakurzpulslaser, konnte bei allen Feldern ein hydrophiles Benetzungsverhalten festgestellt werden. Es kann angenommen werden, dass dieser Effekt auf

chemischen Reaktionen beruht, die durch die einwirkende Laserenergie ausgelöst werden. Durch eine anschließende Lagerung der Probe in Vakuum werden in kurzer Zeit Kohlenwasserstoffe adsorbiert und dies bewirkt eine Änderung des Benetzungsverhaltens von hydrophil zu hydrophob bzw. superhydrophob. Es ist von einem starken Abfall des polaren Oberflächenenergieanteils auszugehen. Um den Einfluss des chemischen Zustandes der laserstrukturierten Oberflächen auf die Messergebnisse, im Vergleich zu den Messwerten einer ebenen unbehandelten Oberfläche weitgehend zu verringern, wurde eine fünf Nanometer dünne Platinschicht sowohl auf eine ebene, nicht polierte Edelstahloberfläche als auch auf die laserstrukturierten Probenfelder mittels Sputterdeposition aufgetragen. Dadurch haben sich die Kontaktwinkel der laserstrukturierten Oberflächen nur geringfügig verringert und jene der ebenen Oberfläche erhöht. Gleichzeitig konnte eine Verringerung der Oberflächenenergie festgestellt werden.

Um die numerischen Untersuchungen an laserstrukturierten Oberflächen durchführen zu können, wurden die Oberflächengeometrien der Proben mit einem optischen 3D Oberflächenmessgerät gescannt und digitalisiert. Dabei hat sich gezeigt, dass eine exakte Darstellung der komplexen Oberflächenstrukturen aufgrund mehrerer Faktoren kaum realisierbar ist. Die erste Einschränkung bildete die begrenzte Auflösung der digitalisierten Oberfläche im STL-Format, die mit einem optischen 3D Oberflächenmessgerät erstellt wurde. Weiters entstand eine Datenreduktion der Oberflächengeometrie durch den Vernetzungsvorgang in OpenFOAM, da das Ausgangsnetz mit Hilfe des „snappyHexMesh“-Vernetzungswerkzeugs nicht exakt an die digitalisierte Oberfläche angepasst werden konnte. Je genauer die Oberflächenstruktur mit einer feineren Vernetzung angenähert wurde, desto größer wurde die Anzahl der verwendeten Zellen. Jede Verfeinerungsstufe ließ die Zellenanzahl sehr stark ansteigen. Dies hatte eine massive Erhöhung des Rechenaufwandes und damit verbunden eine starke Verlängerung der Simulationszeiten zur Folge. Das Ziel war es, die Zellenanzahl so niedrig wie möglich zu halten und die ungefähre Größenordnung aus dem Experiment zu übernehmen. Da jedoch die Größenordnung des Tropfenvolumens aus dem Experiment und die der Oberflächenstrukturierung sehr stark voneinander abwichen, war aufgrund der maximal zur Verfügung stehenden Rechenressourcen die genaue Abbildung des Experiments nur eingeschränkt umsetzbar. Die Simulationen im Rahmen dieser Diplomarbeit beschränkten sich daher auf einen sehr kleinen gescannten Ausschnitt der Oberfläche, wodurch es möglich wurde die Struktur mit einem möglichst feinen Netz (kleineren Zellen) genauer abzubilden. Dadurch musste jedoch das Tropfenvolumen stark verringert werden, sodass eine ähnliche Größenordnung wie im Experiment nicht mehr realisiert werden konnte.

Die Gegenüberstellung der Benetzungszustände eines Wassertropfens auf den laserstrukturierten Oberflächen der Experimente (nach der Lagerung der Oberflächen in einer

Vakuumkammer) und der zugehörigen Simulationen zeigte, dass die Kontaktwinkel bei allen Simulation deutlich geringer waren als jene der experimentellen Versuche. Ein eindeutig hydrophobes Verhalten konnte nicht festgestellt werden. Dies ist auf die nicht verhältnismäßige Skalierung des Tropfens zurückzuführen.

Zukünftige Forschungen könnten an diese Arbeit anknüpfen, indem für derartige Simulationen zunächst ausreichend Rechenressourcen zur Verfügung stehen. Dadurch könnte sowohl die Oberflächenstruktur mit kleinen Zellen möglichst genau abgebildet als auch die Tropfengröße des Experimentes gewahrt werden. Die Simulationen der laserstrukturierten Oberflächen im Rahmen dieser Arbeit wurden auf acht Prozessoren (2,9 GHz) parallel ausgeführt und benötigten mehrere Tage für ihre Fertigstellung. Die Verwendung von weitaus mehr Prozessoren könnte die Rechenzeit der Simulationen durchaus verkürzen. Weiters ist in den Simulationen zu sehen, dass es vor allem in den Randbereichen der Festkörperphase und in den stark nicht-orthogonalen Zellen zu unerwünschten Phasenumwandlungen kam. Außerdem wurde die Nicht-Orthogonalität der Zellen in der „snappyHexMesh“-Datei auf 45° begrenzt, da ein größerer Wert während den Simulationen zu Problemen führte und diese nicht abgeschlossen werden konnten. Eine derartige Begrenzung wirkt sich nachteilig auf die Genauigkeit der Abbildungen der digitalisierten Oberflächen durch die Vernetzung aus, da eckige Übergänge entstehen. Ferner wird vorgeschlagen sich einerseits mit der Wahl der Anfangs- und Randbedingungen noch intensiver auseinanderzusetzen und andererseits die Auswahl der Diskretisierungsmodelle für den Solver zu überdenken.

Sollte eine Vervielfachung eines kleinen gescannten Oberflächenausschnittes angestrebt werden, ist das in Kapitel 4.2. beschriebene Programm „Autodesk Meshmixer“ ein bewährtes Hilfsmittel. Durch Scannen eines größeren Ausschnittes wird die Realität der Oberflächenstruktur gewahrt, jedoch ist der Scanvorgang mit einem höheren Zeitaufwand verbunden. Auch das Beheben von Fehlstellen in einer digitalisierten Oberfläche ist mit diesem Programm einfach zu bewerkstelligen. Bei einem größer werdenden Tropfenvolumen ist mit einer längeren Zeit bis zur Ausbildung eines stabilen Kontaktwinkels zu rechnen. Im Hinblick auf die Ergebnisse der Simulationen von Wenzel- und Cassie-Baxter-Zuständen für regelmäßig strukturierte Oberflächen, wäre es zukünftig anzustreben, zusätzlichen zu den analytischen Ergebnissen auch experimentelle Ergebnisse als Vergleich zu ermitteln. Damit könnten die experimentellen und numerischen Untersuchungen an regelmäßig strukturierten Oberfläche als Vorstudie für komplexere Oberflächen herangezogen werden, um die verwendeten Solvareinstellungen zu überprüfen. Es sollte auch angedacht werden, unterschiedliche regelmäßig strukturierte Oberflächengeometrien zu untersuchen, um Aussagen über den Einfluss der Geometrie auf das Benetzungsverhalten treffen zu können.

Da sämtliche numerische Studien ausschließlich mit Wassertropfen durchgeführt wurden, wäre für nachfolgende Arbeiten eine Parameterstudie mit weiteren Flüssigkeitsmedien eine interessante Weiterführung der vorliegenden Ergebnisse.

Mit den Untersuchungen und den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, dass eine Vernetzung von komplex strukturierten Oberflächen mit Hilfe des „snappyHexMesh“-Vernetzungswerkzeuges möglich und eine Simulation durchführbar ist. Jedoch stellte die genaue Darstellung der feinen Oberflächenstrukturierung und des, im Verhältnis dazu, großen Flüssigkeitstropfens bei den Simulationen noch eine große Herausforderung für das Simulationsprogramm OpenFOAM sowie die benötigten Rechenkapazitäten dar. Mit dem hohen technologischen Fortschritt in Bezug auf Rechenkapazitäten ist jedoch zu erwarten, dass in naher Zukunft eine Simulation mit detaillierter Vernetzung der strukturierten Oberflächen und des Wassertropfens ohne Einschränkung durchführbar sein wird. Das in der Arbeit generierte Simulations-Setup stellt damit eine effiziente Methode dar, um das Benetzungsverhalten und die Anwendbarkeit von laserstrukturierten Oberflächen numerisch vorherzusagen.

11. Literaturverzeichnis

- [1] **G. Pichler**, „*Nano-Technologie: Neues Glas reinigt sich selbst*“, presstext, (2012), URL: <https://www.presstext.com/news/20120427013> (Zugriff: 26.03.2023).
- [2] **Z. Cerman**, „*Superhydrophobie und Selbstreinigung: Wirkungsweise, Effizienz und Grenzen bei der Abwehr von Mikroorganismen*“, Dissertation, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, (2007), URL: <https://bonndoc.ulb.uni-bonn.de/xmlui/handle/20.500.11811/3158> (Zugriff: 26.03.2023).
- [3] **C. Antonini, M. Innocenti, T. Horn, M. Marengo, & A. Amirfazli**, „*Understanding the effect of superhydrophobic coatings on energy reduction in anti-icing systems*“, Cold Regions Science and Technology, vol. 67, no. 1-2, pp. 58–67, (2011), doi: 10.1016/j.coldregions.2011.02.006.
- [4] **L. B. Boinovich & A. M. Emelyanenko**, „*Anti-icing Potential of Superhydrophobic Coatings*“, Mendeleev Communications, vol. 23, no. 1, pp. 3–10, (2013), doi: 10.1016/j.mencom.2013.01.002.
- [5] **F. M. Fowkes**, „*Attractive Forces at Interfaces*“, Industrial and Engineering Chemistry, vol. 56, no. 12, pp. 40–52, (1964), doi: 10.1021/ie50660a008.
- [6] **F. M. Fowkes**, „*Additivity of intermolecular Forces at Interfaces. I. Determination of the contribution to surface and interfacial tensions of dispersion forces in various liquids*“, The Journal of Physical Chemistry, vol. 67, no. 12, pp. 2538–2541, (1963), doi: 10.1021/j100806a008.
- [7] **D. K. Owens & R. C. Wendt**, „*Estimation of the surface free energy of polymers*“, Journal of Applied Polymer Science, vol. 13, no. 8, pp. 1741–1747, (1969), doi: 10.1002/app.1969.070130815.
- [8] **D. H. Kaelble**, „*Dispersion-Polar Surface Tension Properties of Organic Solids*“, The Journal of Adhesion, vol. 2, no. 2, pp. 66–81, (1970), doi: 10.1080/0021846708544582.
- [9] **W. Rabel**, „*Einige Aspekte der Benetzungstheorie und ihre Anwendung auf die Untersuchung und Veränderung der Oberflächeneigenschaften von Polymeren. Farbe und Lack*“, 77 (10), pp. 997-1005, (1971)
- [10] **S. Wu**, „*Calculation of interfacial tension in polymer systems*“, Journal of Polymer Science, vol. 34, no. 1, pp. 19–30, (1971), doi: 10.1002/polc.5070340105.
- [11] **R. J. Good & C. J. van Oss**, „*The Modern Theory of Contact Angles and the Hydrogen Bond Components of Surface Energies*“, Modern Approaches to Wettability, Springer US, pp. 1–27, (1992), doi: 10.1007/978-1-4899-1176-6_1.
- [12] **P. C. Rieke**, „*Application of Van Oss-Chaudhury-Good theory of wettability to interpretation of interfacial free energies of heterogeneous nucleation*“, Journal of Crystal Growth, vol. 182, no. 3-4, pp. 472–484, (1997), doi: 10.1016/s0022-0248(97)00357-6.
- [13] **J. Schultz, C. Cazeneuve, M. E. R. Shanahan & J. B. Donnet**, „*Fibre Surface Energy Characterization*“, The Journal of Adhesion, vol. 12, no. 3, pp. 221–231, (1981), doi: 10.1080/00218468108071202.

- [14] **W. A. Zisman**, „*Influence of Constitution on Adhesion*“, Industrial & Engineering Chemistry, vol. 55, no. 10, pp. 18–38, (1963), doi: 10.1021/ie50646a003.
- [15] **R. N. Wenzel**, „*Resistance of solid surfaces to wetting by water*“, Industrial & Engineering Chemistry, vol. 28, no. 8, pp. 988–994, (1936), doi: 10.1021/ie50320a024.
- [16] **A. B. D. Cassie**, „*Contact angles*“, Discussions of the Faraday Society, vol. 3, p. 11, (1948), doi: 10.1039/df9480300011.
- [17] **A. B. D. Cassie & S. Baxter**, „*Wettability of porous surfaces*“, Transactions of the Faraday Society, vol. 40, p. 546, (1944), doi: 10.1039/TF9444000546.
- [18] **K. Vontas**, „*Enhanced VOF-based CFD simulations of droplet impact*“, Dissertation, Piraeus University of Applied Sciences, (2016), URL: http://oceanis.lib2.uniwa.gr/xmlui/bitstream/handle/123456789/2880/mec_41841_konstantinos_vontas.pdf?sequence=1&isAllowed=y (Zugriff: 27.03.2023).
- [19] **F. Gao**, „*Numerical Simulation of the droplet-surface impact using interFoam*“, Diplomarbeit, Northeastern University Boston, (2015), URL: <https://repository.library.northeastern.edu/files/neu:rx915z808/fulltext.pdf> (Zugriff: 27.03.2023).
- [20] **Y. Wu**, „*Numerical Simulation of Droplet Impact and Rebound on a Wall*“, Masterarbeit, (2017), doi: 10.5445/IR/1000079141
- [21] **N. Boufous**, „*Droplet Impact on Dry, Superhydrophobic Surfaces with Micro-Scale Roughness Elements*“, (2016), URL: <https://scholarsjunction.msstate.edu/td/1580/> (Zugriff: 08.05.2023).
- [22] „*Oberflächenenergie*“, URL: <https://www.chemie.de/lexikon/Oberfl%C3%A4chenenergie.html> (Zugriff: 26.03.2023).
- [23] **E. Spooner**, „*What is Surface Energy? Formula & Definition*“, URL: <https://www.ossila.com/pages/a-guide-to-surface-energy> (Zugriff: 26.03.2023).
- [24] **S. Laurén**, „*What is surface free energy?*“, Biolin Scientific, (2021), URL: <https://www.biolinscientific.com/blog/what-is-surface-free-energy> (Zugriff: 26.03.2023).
- [25] **S. Schließke**, „*Substratfunktionalisierungen zur Optimierung tintenstrahlgedruckter opto-elektronischer Bauteile*“, Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, (2021), doi: 10.5445/IR/1000130024, URL: <https://publikationen.bibliothek.kit.edu/1000130024> (Zugriff: 26.03.2023).
- [26] „*Benetzung*“, URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Benetzung> (Zugriff: 27.03.2023).
- [27] „*Kontaktwinkel*“, URL: <https://www.cosmos-indirekt.de/Physik-Schule/Kontaktwinkel> (Zugriff: 26.03.2023).
- [28] **F. Rupp et al.**, „*A Review on the Wettability of Dental Implant Surfaces: Theoretical and Experimental Aspects*“, Acta Biomaterialia, vol. 10, no. 7, pp. 2894–2906, (2014), doi: 10.1016/j.actbio.2014.02.040.
- [29] **A. Krolle**, „*Benetzbarkeit der Papieroberfläche. Charakterisierung der Papieroberfläche für nachfolgende Verarbeitungsprozesse*“, Dissertation, TU Graz, (2014), URL: <https://diglib.tugraz.at/download.php?id=58dc335184ab6&location=browse> (Zugriff: 26.03.2023).

- [30] **S. Laurén**, „*Surface free energy – what is it and how to measure it?*“, White Paper, Biolin Scientific, (2020), URL: <https://content.biolinscientific.com/wp-surface-free-energy?hsCtaTracking=29afef4e-434a-4215-ac9e-aafa5d1f5a0d%7Cd2ab813a-46da-4a-ce-be5b-318d288ed963> (Zugriff: 26.03.2023).
- [31] „*Van-der-Waals-Kräfte*“, URL: <https://studyflix.de/chemie/van-der-waals-krafte-1561> (Zugriff: 26.03.2023).
- [32] **E. Lugscheider & K. Bobzin**, „*The influence on surface free energy of PVD-coatings*“, Surface and Coatings Technology, vol. 142-144, pp. 755–760, (2001), doi: 10.1016/s0257-8972(01)01315-9.
- [33] „*Polarität*“, URL: <https://studyflix.de/chemie/polaritat-2024> (Zugriff: 26.03.2023).
- [34] „*Wasserstoffbrückenbindung*“, URL: <https://studyflix.de/chemie/wasserstoffbrueckenbindung-1668> (Zugriff: 26.03.2023).
- [35] „*Lewis-Säure-Base-Theorie*“, URL: <https://www.studysmarter.de/schule/chemie/a-norganische-chemie/lewis-saeure-base-theorie/> (Zugriff: 26.03.2023).
- [36] „*Zwischenmolekulare Kräfte*“, URL: <https://studyflix.de/chemie/zwischenmolekulare-krafte-2392> (Zugriff: 26.03.2023).
- [37] „*Methode nach Owens, Wendt, Rabel und Kaelble (OWRK)*“, URL: <https://www.kruss-scientific.com/de-DE/know-how/glossar/methode-nach-owens-wendt-rabel-und-kaelble-owrk> (Zugriff: 26.03.2023).
- [38] **D. Gentner**, „*Langzeitstabile Oberflächenmodifikationen für einen verbesserten Wärmeübergang bei der Kondensation von Wärmeträgermedien*“, Masterarbeit, TU-Graz, (2013), URL: <https://diglib.tugraz.at/download.php?id=576a760c429d0&location=browse> (Zugriff: 26.03.2023).
- [39] **P. Swolana, C. Weigel, T. Geiling, L. Dittrich & D. Frese**, „*Application Report. Benetzung und Rauheit – Was tun, wenn Wenzel nicht funktioniert?*“, Krüss, (2020), URL: <https://www.kruss-scientific.com/de-DE/know-how/applikationsberichte/ar295-benetzung-und-rauheit-was-tun-wenn-wenzel-nicht-funktioniert> (Zugriff: 26.03.2023).
- [40] **M. Alonso Frank**, „*Functionalization of Steels and other Metallic Materials with Hydrophobic Layers - Influence on Wetting and Corrosion Resistance*“, (2017), URL: https://www.researchgate.net/publication/322627227_Functionalization_of_Steels_and_other_Metallic_Materials_with_Hydrophobic_Layers_-_Influence_on_Wetting_and_Corrosion_Resistance (Zugriff: 27.03.2023).
- [41] „*Influence of surface roughness on contact angle and wettability*“, Biolin Scientific, URL: <https://cdn2.hubspot.net/hubfs/516902/Pdf/Attension/Tech%20Notes/AT-TN-07-Surface-roughness-CA-wettability.pdf> (Zugriff: 27.03.2023).
- [42] **S. Laurén**, „*The Attension Theta Flex Optical Tensiometer with 3D Topography Module*“, White Paper, Biolin Scientific, (2020), URL: <https://www.biolinscientific.com/hubfs/Content%20Offer/Attension/EN/AT%20WP%203D%20Topography%202020.pdf> (Zugriff: 26.03.2023).
- [43] „*About OpenFOAM*“, URL: <https://cpp.openfoam.org/v6/> (Zugriff: 26.03.2023).

- [44] **C. Greenshields**, „*OpenFOAM v10 User Guide*“, The OpenFOAM Foundation, (2022), URL: <https://doc.cfd.direct/openfoam/user-guide-v10> (Zugriff: 26.03.2023).
- [45] **S. N. Pachpute**, „*Basics of OpenFOAM: Open source CFD Solver*“, URL: https://cfdflowengineering.com/basics-of-openfoam/#Introduction_to_OpenFOAM (Zugriff: 26.03.2023).
- [46] **A. Roger Ull**, „*Study of mesh deformation features of an open source CFD package and application to a gear pump simulation*“, Masterarbeit, Universitat Politècnica de Catalunya, (2012), URL: <https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2099.1/16479/memory.pdf?sequence=1&isAllowed=y> (Zugriff: 26.03.2023).
- [47] „*A Comprehensive Tour of snappyHexMesh*“, (2012), URL: <https://openfoamwiki.net/images/f/f0/Final-AndrewJacksonSlidesOFW7.pdf> (Zugriff: 27.03.2023).
- [48] „*SnappyHexMesh*“, Tian Building Engineering, (2020), URL: <https://www.building-engineering.de/Manual/SnappyHexMesh.html> (Zugriff: 26.03.2023).
- [49] „*Castellation and refinement*“, (2019), URL: <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-meshing-snappyhexmesh-castellation.html> (Zugriff: 26.03.2023).
- [50] „*Mesh generation with the snappyHexMesh utility*“, URL: <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide/4-mesh-generation-and-conversion/4.4-mesh-generation-with-the-snappyhexmesh-utility> (Zugriff: 26.03.2023).
- [51] „*Parameter Definitions - dynamicRefineFvMesh*“, (2020), URL: https://openfoamwiki.net/index.php/Parameter_Definitions_-_dynamicRefineFvMesh (Zugriff: 26.03.2023).
- [52] „*Running my first OpenFOAM® case setup blindfold*“, wolfdynamics, URL: http://www.wolfdynamics.com/wiki/tut_cavity.pdf (Zugriff: 26.03.2023)
- [53] **M. Buttazoni, C. Zenz, A. Otto, R. G. Vázquez, G. Liedl & J. L. Arias**, „*A Numerical Investigation of Laser Beam Welding of Stainless Steel Sheets with a Gap*“, Applied Sciences, vol. 11, no. 6, p. 2549, (2021), doi: 10.3390/app11062549.
- [54] **F. Rösler & D. Brüggemann**, „*Shell-and-tube type latent heat thermal energy storage: numerical analysis and comparison with experiments*“, Heat and Mass Transfer, vol. 47, no. 8, pp. 1027–1033, Jul. 2011, doi: 10.1007/s00231-011-0866-9.
- [55] **V. R. Voller & C. Prakash**, „*A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems*“, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 30, no. 8, pp. 1709–1719, (1987), doi: 10.1016/0017-9310(87)90317-6.
- [56] **A. Otto, H. Koch & R. G. Vazquez**, „*Multiphysical Simulation of Laser Material Processing*“, Physics Procedia, vol. 39, pp. 843–852, (2012), doi: 10.1016/j.phpro.2012.10.109.
- [57] „*OCA – Optische Kontaktwinkelmessgeräte und Konturanalysesysteme*“, URL: <https://www.dataphysics-instruments.com/de/produkte/oca/> (Zugriff: 27.03.2023).

- [58] „ISO 19403-2: Determination of the surface free energy of solid surfaces by measuring the contact angle“, (2017), URL: <https://cdn.standards.iteh.ai/samples/64809/0bc9a40225784b9590fb4a66b3202f69/ISO-19403-2-2017.pdf> (Zugriff: 27.03.2023).
- [59] „Tropfenkonturanalyse“, URL: <https://www.kruss-scientific.com/de-DE/know-how/glossar/tropfenkonturanalyse> (Zugriff: 26.03.2023).
- [60] „Liegender Tropfen (sessile drop)“, URL: <https://www.kruss-scientific.com/de-DE/know-how/glossar/liegender-tropfen> (Zugriff: 26.03.2023).
- [61] „Basislinie“, URL: <https://www.kruss-scientific.com/de-DE/know-how/glossar/basislinie> (Zugriff: 26.03.2023).
- [62] **B. Podgornik, B. Zajec, S. Strnad & K. Stana-Kleinschek**, „Influence of surface energy on the interactions between hard coatings and lubricants“, *Wear*, vol. 262, no. 9-10, pp. 1199–1204, (2007), doi: 10.1016/j.wear.2006.11.008.
- [63] **G. Aspenes, S. Høiland, T. Barth, K. Askvik, R. Kini & R. Larsen**, „Petroleum hydrate deposition mechanisms: The influence of pipeline wettability“, in Proc. 6th International Conference on Gas Hydrates (ICGH 2008), Vancouver (CAN), (2008).
- [64] **B. Hou, C. Wu, X. Li, J. Huang & M. Chen**, „Contact line-based model for the Cassie-Wenzel transition of a sessile droplet on the hydrophobic micropillar-structured surfaces“, *Applied Surface Science*, vol. 542, p. 148611, (2021), doi: 10.1016/j.apsusc.2020.148611.
- [65] **C.-W. Yao, J. L. Alvarado, C. P. Marsh, B. G. Jones & M. K. Collins**, „Wetting behavior on hybrid surfaces with hydrophobic and hydrophilic properties“, *Applied Surface Science*, vol. 290, pp. 59–65, (2014), doi: 10.1016/j.apsusc.2013.10.188.
- [66] „Sa (mittlere arithmetische Höhe)“, URL: <https://www.keyence.eu/dede/ss/products/microscope/roughness/surface/parameters.jsp> (Zugriff: 26.03.2023).
- [67] „Sz (maximale Höhe)“, URL: https://www.keyence.eu/dede/ss/products/microscope/roughness/surface/tab01_b.jsp (Zugriff: 26.03.2023).
- [68] „Sdr (Entwickeltes Grenzflächenverhältnis)“, URL: https://www.keyence.eu/dede/ss/products/microscope/roughness/surface/tab03_b.jsp (Zugriff: 26.03.2023).
- [69] „Sdq (Quadratischer Neigungsmittelwert)“, URL: https://www.keyence.eu/dede/ss/products/microscope/roughness/surface/tab03_a.jsp (Zugriff: 26.03.2023).
- [70] **R. Fürbacher, G. Liedl & A. Otto**, „Fast transition from hydrophilic to superhydrophobic, icephobic properties of stainless steel samples after femtosecond laser processing and exposure to hydrocarbons“, *Procedia CIRP*, vol. 111, pp. 643–647, (2022), doi: 10.1016/j.procir.2022.08.016.
- [71] „Sputtern“, URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Sputtern> (Zugriff: 26.03.2023).

12. Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Ausgeglichene Wechselwirkungen im Inneren eines Stoffes und unausgeglichene Wechselwirkungen an der Oberfläche [24]	6
Abbildung 2: Darstellung des Kontaktwinkels θ eines Flüssigkeitstropfens auf einer festen Oberfläche in gasförmiger Umgebung [26]	6
Abbildung 3: Grundlegendes Verhalten des Kontaktwinkels abhängig von der Oberflächenenergie von Festkörper und Flüssigkeit [23]	7
Abbildung 4: Benetzungseigenschaften von unterschiedlichen Wasser-Festkörper-Kombinationen [27]	8
Abbildung 5: Strukturformel von Diiodmethan (CH_2I_2) [23]	11
Abbildung 6: Grafische Darstellung der OWRK-Methode mit Hilfe von der Ergebnissen von mehreren Flüssigkeiten zur Bestimmung der dispersiven und polaren Oberflächenenergieanteilen eines Festkörpers [23]	12
Abbildung 7: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen zwischen einer Flüssigkeit und einem Festkörper mit unterschiedlichen polaren und dispersiven Oberflächenenergieanteilen [37]	13
Abbildung 8: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen zwischen einer Flüssigkeit und einem Festkörper mit gleichen polaren und dispersiven Oberflächenenergieanteilen [37]	14
Abbildung 9: Zisman-Methode zur Bestimmung der Oberflächenenergie einer Festkörperoberfläche [23]	16
Abbildung 10: Schematische Darstellung des Wenzel- (a) und Cassie-Baxter-Zustandes (b) [40]	17
Abbildung 11: Schematische Darstellung des gemessenen makroskopischen Kontaktwinkels θ_m auf einer strukturierten Oberfläche im Wenzel-Zustand [41]	17
Abbildung 12: Gesamtstruktur von OpenFOAM [44]	19
Abbildung 13: Grundlegende Verzeichnisstruktur einer OpenFOAM-Simulation [44]	21
Abbildung 14: Angezeigte Fehlstellen im STL-File einer gescannten Oberfläche	22
Abbildung 15: Oberfläche mit Fehlstellen (links); Oberfläche nach Bearbeitung (rechts)	23
Abbildung 16: Vervielfachung jener Fläche aus Abbildung 15	24
Abbildung 17: Grundlegender Aufbau der ParaView-Visualisierungssoftware: Pipeline Browser (a), Properties (b), Zeit- und Ansichtseinstellungen (c), grafische Ausgabe der Simulation (d)	25
Abbildung 18: Übersicht Simulationscase-Verzeichnis	26
Abbildung 19: Übersicht system- Verzeichnis	26
Abbildung 20: Übersicht Zeitverzeichnis	26

Abbildung 21: Übersicht constant-Verzeichnis.....	26
Abbildung 22: Kopf eines Parameterfiles mit Informationen über OpenFOAM und die ausgewählte Datei.....	27
Abbildung 23: Geometrische Darstellung des Simulationsraumes; Hexaederförmiger Block mit beschrifteten Eckpunkten [44].....	28
Abbildung 24: Auswahl der durchzuführenden Vernetzungsprozesse und Spezifizierung der verwendeten Geometrien.	29
Abbildung 25: Ausmaß der Verfeinerungsschritte des Ausgangsnetzes [47]	30
Abbildung 26: Übersicht der Parameter des Vernetzungsprozesses „castellatedMesh“	30
Abbildung 27: Parameter des Vernetzungsprozesses „snap“	32
Abbildung 28: Zustand nach dem ersten Vernetzungsprozess „castellatedMesh“ (a); Zustand nach dem zweiten Vernetzungsprozess „snap“ (b) [44].....	32
Abbildung 29: Parameter einer gezielten Verfeinerung in der „dynamicMeshDict“-Datei	33
Abbildung 30: Festlegung der Dimension, der Anfangs- und Randbedingungen eines jeden Feldes	34
Abbildung 31: Implementierung von dispersivem und polarem Oberflächenenergieanteil einer Phase.....	35
Abbildung 32: Parameter einer „controlDict“-Datei.....	35
Abbildung 33: Kontaktwinkelmessgerät OCA 25 von DataPhysics	42
Abbildung 34: Schematischer Aufbau des OCA 25 Kontaktwinkelmessgerätes [57].....	43
Abbildung 35: Polierte metallische Proben (Kupfer, Messing, Aluminium, Edelstahl).....	43
Abbildung 36: Einmal-Küvette aus Polystyrol (oben); Glasplatte (unten)	44
Abbildung 37: Platzierung von Flüssigkeitstropfen auf einer Probenoberfläche: Dosiervorgang (a) [58], im Experiment (b).....	44
Abbildung 38: Schattenbild eines Flüssigkeitstropfens auf reflektierender Festkörperoberfläche mit Kennzeichnung von Basislinie, Konturlinie und Kontaktwinkel [59]	45
Abbildung 39: Wassertropfen auf der Aluminium-legierungsoberfläche (Messung 1)	46
Abbildung 40: Wassertropfen auf der Edelstahl-oberfläche (Messung 2).....	46
Abbildung 41: Wassertropfen auf der Messing-oberfläche (Messung 5)	46
Abbildung 42: Wassertropfen auf der Kupfer-oberfläche (Messung 1).....	46
Abbildung 43: Wassertropfen auf der Glas-oberfläche (Messung 3).....	46
Abbildung 44: Wassertropfen auf der Polystyrol-oberfläche (Messung 3).....	46
Abbildung 45: Diiodmethantropfen auf der Kupferoberfläche (Messung 1)	47
Abbildung 46: Diiodmethantropfen auf der Aluminium-oberfläche (Messung 2).....	47
Abbildung 47: Diiodmethantropfen auf der Edelstahl-oberfläche (Messung 2).....	47

Abbildung 48: Diiodmethantropfen auf der Messing-oberfläche (Messung 1)	47
Abbildung 49: Diiodmethantropfen auf der Glasoberfläche (Messung 3)	47
Abbildung 50: Diiodmethantropfen auf der Polystyrol-oberfläche (Messung 2)	47
Abbildung 51: Mittelwerte der Kontaktwinkel zwischen den verschiedenen Materialoberflächen und einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen	48
Abbildung 52: Ermittelte Oberflächenenergieanteile der verschiedenen Festkörperoberflächen.....	49
Abbildung 53: Ermittelte Grenzflächenenergien der verschiedenen Festkörperoberflächen .	50
Abbildung 54: Gesamte Geometrie des Cases eines fallenden Flüssigkeitstropfen auf eine ideal ebene Oberfläche (rote Zellen: Luft; blaue Zellen: Festkörpermateriale); Abmessungen in Meter	51
Abbildung 55: Ausgangszustand der Simulationen	52
Abbildung 56: Simulationsergebnis Aluminiumoberfläche.....	53
Abbildung 57: Simulationsergebnis Edelstahloberfläche.....	53
Abbildung 58: Simulationsergebnis Kupferoberfläche.....	53
Abbildung 59: Simulationsergebnis Messingoberfläche	53
Abbildung 60: Simulationsergebnis Glasoberfläche	53
Abbildung 61: Simulationsergebnis Polystyroloberfläche.....	53
Abbildung 62: Darstellung der Flüssigkeitsphase eines Simulationsergebnisses mit der X- Ray Farbskala (a) und Tropfenkontur nach der Bearbeitung mit dem Grafikprogramm GIMP (b)	54
Abbildung 63: Benetzungszustand der Aluminiumoberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)	55
Abbildung 64: Benetzungszustand der Edelstahloberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)	55
Abbildung 65: Benetzungszustand der Kupferoberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)	55
Abbildung 66: Benetzungszustand der Messingoberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)	55
Abbildung 67: Benetzungszustand der Glasoberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)	56
Abbildung 68: Benetzungszustand der Polystyroloberfläche im Experiment (links) und in der Simulation (rechts)	56
Abbildung 69: Darstellung der regelmäßig mikrostrukturierten Oberfläche in den Simulationen	57
Abbildung 70: Querschnitt in Y-Z-Ebene der mikrostrukturierten Oberfläche	58

Abbildung 71: Abmessungen der Mikrosäulenstrukturierung	58
Abbildung 72: Kontaktwinkel eines Wassertropfen mit einer rein dispersiven Festkörperoberfläche in Abhängigkeit von der Festkörperoberflächenenergie.....	59
Abbildung 73: Ausgangszustand der Simulationen mit einer regelmäßig strukturierten Oberfläche.....	60
Abbildung 74: Anpassung der Vernetzung bei einem Wenzel-Benetzungsverhalten: feinere Vernetzung in den Zwischenräumen der Oberflächenstruktur	61
Abbildung 75: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-80: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)	61
Abbildung 76: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-90: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)	62
Abbildung 77: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-100: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)	62
Abbildung 78: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-110: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)	63
Abbildung 79: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-120: Young-Zustand (links), Wenzel-Zustand (rechts)	63
Abbildung 80: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-135: Young-Zustand (links), Cassie-Baxter-Zustand (rechts).....	64
Abbildung 81: Vergleich der Simulationsergebnisse von Case-160: Young-Zustand (links), Cassie-Baxter-Zustand (rechts).....	64
Abbildung 82: Gegenüberstellung der analytischen Ergebnisse und der Simulationsergebnisse: Kontaktwinkel nach Wenzel bzw. Cassie-Baxter in Abhängigkeit von jenem nach Young	66
Abbildung 83: Edelstahlprobe mit unterschiedlich laserstrukturierten Feldern	67
Abbildung 84: Gescannte laserstrukturierte Oberfläche (LIPSS) von Feld 1: Darstellung der Textur mit dem Programm Meshmixer (links), Darstellung der Höhenunterschiede (rechts) .	68
Abbildung 85: Gescannte laserstrukturierte Oberfläche (Gittermuster) von Feld 2: Darstellung der Textur mit dem Programm Meshmixer (links), Darstellung der Höhenunterschiede (rechts).....	68
Abbildung 86: Gescannte laserstrukturierte Oberfläche (Vertiefungen) von Feld 3: Darstellung der Textur mit dem Programm Meshmixer (oben links und unten), Darstellung der Höhenunterschiede (oben rechts)	69
Abbildung 87: Gescannte laserstrukturierte Oberfläche (Rautengitter) von Feld 4: Darstellung der Textur mit dem Programm Meshmixer (links), Darstellung der Höhenunterschiede (rechts).....	69

Abbildung 88: Wassertropfen auf Feld 1 – Messung 4	70
Abbildung 89: Wassertropfen auf Feld 2 – Messung 5	70
Abbildung 90: Wassertropfen auf Feld 3 – Messung 3	71
Abbildung 91: Wassertropfen auf Feld 4 – Messung 3	71
Abbildung 92: Diiodmethantropfen auf Feld 1 – Messung 3.....	71
Abbildung 93: Diiodmethantropfen auf Feld 2 – Messung 5.....	71
Abbildung 94: Diiodmethantropfen auf Feld 3 – Messung 2.....	71
Abbildung 95: Diiodmethantropfen auf Feld 4 – Messung 4.....	71
Abbildung 96: Übersicht der gemessenen Kontaktwinkel der laserstrukturierten Felder mit einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen (unmittelbar nach Herstellung der Oberflächen)...	72
Abbildung 97: Wassertropfen auf Feld 1 – Messung 3	73
Abbildung 98: Wassertropfen auf Feld 2 – Messung 2	73
Abbildung 99: Wassertropfen auf Feld 3 – Messung 2	74
Abbildung 100: Wassertropfen auf Feld 4 – Messung 2.....	74
Abbildung 101: Diiodmethantropfen auf Feld 1 – Messung 6.....	74
Abbildung 102: Diiodmethantropfen auf Feld 2 – Messung 6.....	74
Abbildung 103: Diiodmethantropfen auf Feld 4 – Messung 6.....	75
Abbildung 104: Volle Benetzbarkeit von Feld 3 mit Diiodmethantropfen	75
Abbildung 105: Übersicht der gemessenen Kontaktwinkel der laserstrukturierten Felder mit einem Wasser- bzw. Diiodmethantropfen (nach Lagerung der Oberflächen in einer Vakuumkammer).....	75
Abbildung 106: Wassertropfen auf ebener beschichteter Oberfläche (Messung 1).....	77
Abbildung 107: Wassertropfen auf beschichtetem Feld 1 (Messung 1)	77
Abbildung 108: Wassertropfen auf beschichtetem Feld 2 (Messung 1)	77
Abbildung 109: Wassertropfen auf beschichtetem Feld 3 (Messung 2)	77
Abbildung 110: Wassertropfen auf beschichtetem Feld 4 (Messung 2)	77
Abbildung 111: Diiodmethantropfen auf ebener beschichteter Oberfläche (Messung 1).....	78
Abbildung 112: Diiodmethantropfen auf beschichtetem Feld 1 (Messung 1).....	78
Abbildung 113: Diiodmethantropfen auf beschichtetem Feld 2 (Messung 6).....	78
Abbildung 114: Diiodmethantropfen auf beschichtetem Feld 4 (Messung 2).....	78
Abbildung 115: Grafische Darstellung der gemessenen Kontaktwinkel von verschiedenen ebenen und strukturierten Oberflächen mit Wasser- bzw. Diiodmethan.....	81
Abbildung 116: Gegenüberstellung der berechneten Oberflächenenergieanteile der verschiedenen Festkörperoberflächen zu verschiedenen Zeitpunkten.....	83
Abbildung 117: Gegenüberstellung der berechneten Grenzflächenenergien zwischen verschiedenen Oberflächen und einem Wassertropfen zu unterschiedlichen Zeitpunkten....	84

Abbildung 118: Auszug aus der snappyHexMeshDict-Datei. Es werden zwei verschiedene Zellzonen definiert. Eine beinhaltet die Zellen über der strukturierten Oberfläche (Luft) und die andere die Zellen unter dieser (Festkörper). In diesem Fall entsprechen die Flächen (Top_Face und Bottom_Face) den oberen und unteren Randflächen der Domäne, die in der blockMeshDict-Datei definiert wurden.86

Abbildung 119: Isometrische Darstellung der vernetzten Festkörperoberfläche von Feld 2 ..87

Abbildung 120: Vergleich der vernetzten strukturierten Oberfläche von Feld 2 mittels OpenFOAM (links) mit der digitalisierten Referenzoberfläche dargestellt im Programm MeshMixer (rechts).....88

Abbildung 121: Mittiger Schnitt der Domäne in y-z-Ebene. Vernetzung des Ausgangszustandes einer Simulation des fallenden Wassertropfens (grau) auf die Festkörperoberfläche von Feld 2 (blau) in umgebender Gasphase (rot).88

Abbildung 122: Isometrische Darstellung der vernetzten Festkörperoberfläche von Feld 3 ..89

Abbildung 123: Vergleich der vernetzten strukturierten Oberfläche von Feld 3 mittels OpenFOAM (links) mit der digitalisierten Referenzoberfläche dargestellt im Programm MeshMixer (rechts).....89

Abbildung 124: Mittiger Schnitt der Domäne in y-z-Ebene. Vernetzung des Ausgangszustandes einer Simulation des fallenden Wassertropfens (grau) auf die Festkörperoberfläche von Feld 3 (blau) in umgebender Gasphase (rot).90

Abbildung 125: Isometrische Darstellung der vernetzten Festkörperoberfläche von Feld 4 ..91

Abbildung 126: Vergleich der vernetzten strukturierten Oberfläche von Feld 4 mittels OpenFOAM (links) mit der digitalisierten Referenzoberfläche dargestellt im Programm MeshMixer (rechts).....91

Abbildung 127: Mittiger Schnitt der Domäne in y-z-Ebene. Vernetzung des Ausgangszustandes einer Simulation des fallenden Wassertropfens (grau) auf die Festkörperoberfläche von Feld 2 (blau) in umgebender Gasphase (rot).92

Abbildung 128: Mittiger Schnitt der Domäne in y-z-Ebene am Ende der Simulation. Der Wassertropfen (grau) benetzt die Festkörperoberfläche von Feld 2 (blau) in umgebender Gasphase (rot)93

Abbildung 129: Ansicht von oben auf den liegenden Wassertropfen (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 2 (blau). Unerwünschte Phasenumwandlungen in den Randzonen der Festkörperoberfläche (grau dargestellte Zellen am Rand).94

Abbildung 130: Isometrische Ansicht des liegenden Wassertropfens (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 2 (blau).....94

Abbildung 131: Mittiger Schnitt der Domäne in y-z-Ebene am Ende der Simulation. Der Wassertropfen (grau) benetzt die Festkörperoberfläche von Feld 3 (blau) in umgebender

Gasphase (rot). Lufteinschlüsse sind deutlich in den Vertiefungen unterhalb des Tropfens zu erkennen.95

Abbildung 132: Ansicht von oben auf den liegenden Wassertropfen (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 3 (blau). Unerwünschte Phasenumwandlungen in den Randzonen der Festkörperoberfläche (grau dargestellte Randzellen).95

Abbildung 133: Isometrische Ansicht des liegenden Wassertropfens (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 3 (blau)96

Abbildung 134: Ansicht von unten auf den liegenden Wassertropfen (grau) und die Gasphase (rot). Die laserstrukturierte Oberfläche von Feld 3 ist nicht dargestellt. Die Lufteinschlüsse in den Vertiefungen der Struktur unterhalb des Wassertropfens sind gut zu erkennen (rot).....96

Abbildung 135: Mittiger Schnitt der Domäne in y-z-Ebene am Ende der Simulation. Der Wassertropfen (grau) benetzt die Festkörperoberfläche von Feld 4 (blau) in umgebender Gasphase (rot)97

Abbildung 136: Ansicht von oben auf den liegenden Wassertropfen (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 4 (blau). Unerwünschte Phasenumwandlungen in den Randzonen der Festkörperoberfläche (grau dargestellte Zellen am Rand).97

Abbildung 137: Isometrische Ansicht des liegenden Wassertropfens (grau/orange) auf der laserstrukturierten Oberfläche von Feld 4 (blau)98

Abbildung 138: Gegenüberstellung der gemessenen Kontaktwinkel eines Wassertropfens auf der Oberfläche von Feld 2: Experiment (links), Simulation (rechts)99

Abbildung 139: Gegenüberstellung der gemessenen Kontaktwinkel eines Wassertropfens auf der Oberfläche von Feld 3: Experiment (links), Simulation (rechts)99

Abbildung 140: Gegenüberstellung der gemessenen Kontaktwinkel eines Wassertropfens auf der Oberfläche von Feld 4: Experiment (links), Simulation (rechts)..... 100

13. Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Übersicht und Zusammenhang zwischen energetischen Verhältnissen und Benetzbarkeit [28]	8
Tabelle 2: Gemessene Kontaktwinkel von verschiedenen Materialoberflächen mit einem Wassertropfen	45
Tabelle 3: Gemessene Kontaktwinkel von verschiedenen Materialoberflächen mit einem Diiodmethantropfen	46
Tabelle 4: Ermittelte Oberflächenenergieanteile und gesamte Oberflächenenergie von verschiedenen Materialoberflächen	48
Tabelle 5: Ermittelte Grenzflächenenergien von verschiedenen Festkörperoberflächen mit einem Wassertropfen	50
Tabelle 6: Übersicht der untersuchten Cases mit Young'schem Kontaktwinkel (θ_Y) als Ausgangspunkt. Die Oberflächenenergie der Festkörperoberfläche σ_{SG} wird je Case sowohl der ebenen als auch der strukturierten Oberfläche übergeben. Analytische Ergebnisse der sich einstellenden Kontaktwinkel nach der Wenzel (θ_W) & Cassie-Baxter (θ_{CB}) Theorie.....	59
Tabelle 7: Gegenüberstellung der analytischen Ergebnisse und der Simulationsergebnisse	65
Tabelle 8: Auswahl von Rauheitsparameterwerten der einzelnen laserstrukturierten Felder	70
Tabelle 9: Gemessene Kontaktwinkel mit einem Wassertropfen unmittelbar nach der Herstellung	71
Tabelle 10: Gemessene Kontaktwinkel mit einem Diiodmethantropfen unmittelbar nach der Herstellung	72
Tabelle 11: Gemessene Kontaktwinkel laserstrukturierter Oberflächenfelder (nach Lagerung in einer Vakuumkammer) mit einem 10 μ l Wassertropfen.....	73
Tabelle 12: Gemessene Kontaktwinkel laserstrukturierter Oberflächenfelder (nach Lagerung in einer Vakuumkammer) mit einem 5 μ l Diiodmethantropfen.....	74
Tabelle 13: Gemessene Kontaktwinkel mit einem 10 μ l Wassertropfen (Ebene Oberfläche vor und nach dem Sputtern bzw. laserstrukturierte Felder 1-4 nach dem Sputtern).....	76
Tabelle 14: Gemessene Kontaktwinkel mit einem 5 μ l Diiodmethantropfen (Ebene Oberfläche vor und nach dem Sputtern bzw. laserstrukturierte Felder 1-4 nach dem Sputtern)	78
Tabelle 15: Übersicht der gemessenen Kontaktwinkel und der resultierenden Oberflächen- und Grenzflächenenergien von verschiedenen ebenen und laserstrukturierten Oberflächen	80

14. Anhang

14.1. Dateiauszüge: Benetzung ebener Oberflächen

14.1.1. blockMeshDict.block3D

```
// Definition der Geometrie

PLATE_WIDTH_X      0.005;          // Plattenbreite
PLATE_THICKNESS_Y  0.0001;         // Plattendicke
PLATE_LENGTH_Z     0.005;          // Plattenlänge
UPPER_GAP_Y        0.003;          // Atmosphäre (Luftbereich)

// Festlegung der Zellengröße und -anzahl

CELL_SIZE          0.0001;

// PLATE_WIDTH_X, PLATE_THICKNESS_Y, PLATE_LENGTH_Z und UPPER_GAP_Y müssen mit
// CELL_SIZE ganzzahlig teilbar sein

CELLS_X            #calc "$PLATE_WIDTH_X/$CELL_SIZE";
CELLS_Z            #calc "$PLATE_LENGTH_Z/$CELL_SIZE";
CELLS_Y_UPPER_GAP #calc "$UPPER_GAP_Y/$CELL_SIZE";
CELLS_Y_PLATE      #calc "$PLATE_THICKNESS_Y/$CELL_SIZE";

// Berechnungen für Eckpunktkoordinaten

HALF_X             #calc "$PLATE_WIDTH_X/2";
HALF_Z             #calc "$PLATE_LENGTH_Z/2";
negHALF_X          #calc "-$HALF_X";
negHALF_Z          #calc "-$HALF_Z";
Y_REF              0;
Y_TOP              #calc "$Y_REF+$UPPER_GAP_Y";
Y_PLATE            #calc "$Y_REF-$PLATE_THICKNESS_Y";

// Festlegung der Maßeinheit

convertToMeters 1.0;          // Alle Werte sind in Meter angegeben

// Festlegung der Eckpunktkoordinaten

vertices
(
  ( $negHALF_X $Y_PLATE $negHALF_Z ) // 0
  ( $negHALF_X $Y_PLATE $HALF_Z ) // 1
  ( $HALF_X $Y_PLATE $HALF_Z ) // 2
  ( $HALF_X $Y_PLATE $negHALF_Z ) // 3
  ( $negHALF_X $Y_REF $negHALF_Z ) // 4
  ( $negHALF_X $Y_REF $HALF_Z ) // 5
  ( $HALF_X $Y_REF $HALF_Z ) // 6
  ( $HALF_X $Y_REF $negHALF_Z ) // 7
  ( $negHALF_X $Y_TOP $negHALF_Z ) // 8
  ( $negHALF_X $Y_TOP $HALF_Z ) // 9
  ( $HALF_X $Y_TOP $HALF_Z ) // 10
  ( $HALF_X $Y_TOP $negHALF_Z ) // 11
);
```

```
blocks
(
  hex (0 3 7 4 1 2 6 5) workpiece ($CELLS_X $CELLS_Y_PLATE $CELLS_Z)
  simpleGrading (1 1 1)
  hex (4 7 11 8 5 6 10 9) atmosphereTop ($CELLS_X $CELLS_Y_UPPER_GAP $CELLS_Z)
  simpleGrading (1 1 1)
);

edges
(
);

boundary
(
  upperBoundary
  {
    type patch;
    faces
    (
      ( 8 9 10 11 ) // (+y)
    );
  }

  atmosphere
  {
    type patch;
    faces
    (
      ( 7 4 8 11 ) // (-z)
      ( 4 5 9 8 ) // (-x)
      ( 5 6 10 9 ) // (+z)
      ( 6 7 11 10 ) // (+x)
    );
  }

  workpiece
  {
    type patch;
    faces
    (
      ( 3 0 4 7 ) // (-z)
      ( 0 1 5 4 ) // (-x)
      ( 1 2 6 5 ) // (+z)
      ( 2 3 7 6 ) // (+x)
      ( 0 3 2 1 ) // (-y)
    );
  }
);

mergePatchPairs
(
);
```

14.1.2. dynamicMeshDict.orig

```
FIELD0_DICT
{
    refineInterval      1;
    field               alpha.water;
    unrefineLevel       10;
    lowerRefineLevel    0.01;
    upperRefineLevel    0.95;
    maxRefinement        1;
    nBufferLayers       1;
}

FIELD1_DICT
{
    refineInterval      10;
    field               staticRefine2;
    unrefineLevel       0.1;
    lowerRefineLevel    0.9;
    upperRefineLevel    2;
    maxRefinement        1;
    nBufferLayers       1;
}v
```

14.1.3. AISI304.inp

Hierbei handelt es sich nur um einen groben Überblick der gewählten Modelle und der enthaltenen Aggregatzustände der Phase.

```
WORKPIECE
{
  densityModel temperatureFunction;

  bulkModulusModel temperatureFunction;

  transportModel Arrhenius;

  surfaceEnergyModel simplePolar;

  simplePolarSurfaceEnergyCoeffs
  {
    sigma      0.02901;      // Dispersiver Anteil
    sigmaPolar 0.00261;      // Polarer Anteil
  }

  specificHeatCapacityModel temperatureFunction;

  thermalConductivityModel temperatureFunction;

  state      solid;
  phaseChanges true;
  material    steel;
}

WORKPIECE_RESOLID
{
}

WORKPIECE_LIQUID
{
}

WORKPIECE_VAPOUR
{
}
```

14.1.4. transportProperties

```
T_REF 298.15;

P_REF 1e5;

PLOT_DICT
{
    plot false;
    Tmin 273.15;
    Tmax 3000;
}

// Surrounding phase
#include "materials/air.inp"

// Steel
#include "materials/AISI304.inp"

// Water
#include "materials/water.inp"

phases
(
    steel
    {
        $WORKPIECE;
    }

    water
    {
        $waterLiquid_properties;
    }

    surroundingPhase
    {
        $SURROUNDING_PHASE;
    }
);
```

14.1.5. setFieldsDict.orig

```
defaultFieldValues
(
    volScalarFieldValue alpha.surroundingPhase    1
    volScalarFieldValue alpha.steel              0
    volScalarFieldValue alpha.water              0
);

regions
(
    sphereToCell
    {
        centre      (0 0.0013 0);
        radius       0.0012;
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue alpha.surroundingPhase    0
            volScalarFieldValue alpha.steel              0
            volScalarFieldValue alpha.water              1
        );
    }

    zoneToCell
    {
        name        "workpiece";
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue alpha.surroundingPhase    0
            volScalarFieldValue alpha.steel              1
            volScalarFieldValue alpha.water              0
        );
    }

    cylinderToCell
    {
        p1 (0 -0.0001 0);
        p2 (0 0.0000 0);
        radius 0.0023;
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue staticRefine2 1
        );
    }
);
```

14.1.6. controlDict.orig

```
application      multiphaseInterDyMLaserFoam-droplet;
startFrom        latestTime;
startTime        0;
stopAt           endTime;
endTime          0.2;
deltaT           1e-6;
writeControl     runtime;
purgeWrite       0;
writeFormat      binary;
writePrecision   10;
writeCompression uncompressed;
timeFormat       general;
timePrecision    10;
runtimeModifiable yes;
adjustTimeStep   yes;
maxCo            0.8;
maxDeltaT        1e-4;
writeInterval    0.002;
```

14.2. Dateiauszug: Wenzel- & Cassie-Baxter-Zustände

setFieldsDict.orig

```
defaultFieldValues
(
    volScalarFieldValue alpha.surroundingPhase    1
    volScalarFieldValue alpha.steel              0
    volScalarFieldValue alpha.water              0
    volScalarFieldValue staticRefine2            0
);

LENGTH          0.00122;
NEGLENGTH       -0.00122;
DEPTH           -0.00008;

regions
(
    sphereToCell
    {
        centre (0.0000 0.00088 0);
        radius 0.00084;
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue alpha.surroundingPhase    0
            volScalarFieldValue alpha.steel                0
            volScalarFieldValue alpha.water                1
        );
    }

    zoneToCell
    {
        name "workpiece";
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue alpha.surroundingPhase    0
            volScalarFieldValue alpha.steel                1
            volScalarFieldValue alpha.water                0
        );
    }

    boxToCell
    {
        boxes
        (
            (-0.00118 $DEPTH $NEGLENGTH) (-0.00114 0.0000 $LENGTH)
            (-0.00110 $DEPTH $NEGLENGTH) (-0.00106 0.0000 $LENGTH)
            (-0.00102 $DEPTH $NEGLENGTH) (-0.00098 0.0000 $LENGTH)

            ...

            ( 0.00098 $DEPTH $NEGLENGTH) ( 0.00102 0.0000 $LENGTH)
            ( 0.00106 $DEPTH $NEGLENGTH) ( 0.00110 0.0000 $LENGTH)
            ( 0.00114 $DEPTH $NEGLENGTH) ( 0.00118 0.0000 $LENGTH)
        )
    }
);
```

```

        ($NEGLLENGTH $DEPTH -0.00118) ($LENGTH 0.0000 -0.00114)
        ($NEGLLENGTH $DEPTH -0.00110) ($LENGTH 0.0000 -0.00106)
        ($NEGLLENGTH $DEPTH -0.00102) ($LENGTH 0.0000 -0.00098)

        ...

        ($NEGLLENGTH $DEPTH 0.00098) ($LENGTH 0.0000 0.00102)
        ($NEGLLENGTH $DEPTH 0.00106) ($LENGTH 0.0000 0.00110)
        ($NEGLLENGTH $DEPTH 0.00114) ($LENGTH 0.0000 0.00118)
    );

    fieldValuees
    (
        volScalarFieldValue alpha.water 0
        volScalarFieldValue alpha.steel 0
        volScalarFieldValue alpha.surroundingPhase 1
    );
}

boxToCell
{
    box (-1 -1 -1)(1 0.00004 1);
    fieldValuees
    (
        volScalarFieldValue staticRefine2 1
    );
}

);

```